



PCT

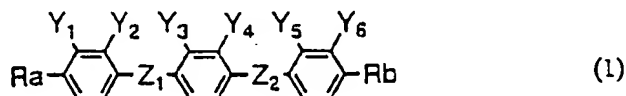
特許協力条約に基づいて公開された国際出願

<p>(51) 国際特許分類6 C07C 25/18, 43/225, 43/174, C09K 19/10, G02F 1/13</p>	<p>A1</p>	<p>(11) 国際公開番号 WO98/23563</p> <p>(43) 国際公開日 1998年6月4日 (04.06.98)</p>
<p>(21) 国際出願番号 PCT/JP97/04330</p> <p>(22) 国際出願日 1997年11月27日 (27.11.97)</p> <p>(30) 優先権データ 特願平8/332767 1996年11月28日 (28.11.96) JP</p> <p>(71) 出願人 (米国を除くすべての指定国について) チッソ株式会社(CHISSO CORPORATION)[JP/JP] 〒530 大阪府大阪市北区中之島三丁目6番32号 Osaka, (JP)</p> <p>(72) 発明者 ; および</p> <p>(75) 発明者 / 出願人 (米国についてのみ) 近藤智之(KONDO, Tomoyuki)[JP/JP] 〒290 千葉県市原市辰巳台東3丁目27番地2号 Chiba, (JP) 松井秋一(MATSUI, Shuichi)[JP/JP] 〒290 千葉県市原市辰巳台東2丁目17番地 Chiba, (JP) 宮沢和利(MIYAZAWA, Kazutoshi)[JP/JP] 〒290-01 千葉県市原市ちはら台3-27-7 Chiba, (JP) 竹内弘行(TAKEUCHI, Hiroyuki)[JP/JP] 〒290 千葉県市原市西広353番地1 Chiba, (JP) 竹下房幸(TAKESHITA, Fusayuki)[JP/JP] 〒299-11 千葉県君津市中富939番地5 Chiba, (JP)</p>		<p>中川悦男(NAKAGAWA, Etsuo)[JP/JP] 〒290 千葉県市原市五井8890番地 Chiba, (JP)</p> <p>(74) 代理人 弁理士 川北武長(KAWAKITA, Takenaga) 〒103 東京都中央区日本橋茅場町二丁目3番6号 宗和ビルディング Tokyo, (JP)</p> <p>(81) 指定国 AL, AU, BA, BB, BG, BR, CA, CN, CU, CZ, EE, GE, HU, ID, IL, IS, JP, KR, LC, LK, LR, LT, LV, MG, MK, MN, MX, NO, NZ, PL, RO, SG, SI, SK, SL, TR, TT, UA, US, UZ, VN, YU, ARIPO特許 (GH, KE, LS, MW, SD, SZ, UG, ZW), ユーラシア特許 (AM, AZ, BY, KG, KZ, MD, RU, TJ, TM), 欧州特許 (AT, BE, CH, DE, DK, ES, FI, FR, GB, GR, IE, IT, LU, MC, NL, PT, SE), OAPI特許 (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, ML, MR, NE, SN, TD, TG).</p> <p>添付公開書類 国際調査報告書</p>
<p>(54)Title: LIQUID CRYSTAL COMPOUNDS EXHIBITING NEGATIVE ANISOTROPY OF PERMITTIVITY, LIQUID CRYSTAL COMPOSITIONS, AND LIQUID CRYSTAL DISPLAYS</p> <p>(54)発明の名称 負の誘電率異方性値を有する液晶性化合物、液晶組成物および液晶表示素子</p> <div style="text-align: center;"> <p>(1)</p> </div> <p>(57) Abstract Liquid crystal compounds which exhibit not only a negative anisotropy of permittivity but also extremely high voltage retention and low threshold voltages, are reduced in the temperature dependence of these properties, difficultly exhibit a smectic phase, and are excellent in compatibility with other liquid crystal materials; liquid crystal compositions containing the same; and liquid crystal displays made by using the compositions. The compounds are represented by general formula (1).</p>		

(57) 要約

負の誘電率異方性値を示すと共に極めて高い電圧保持率および低いしきい値電圧を有し、また、それらの温度依存性が極めて小さく、スメクチック相を示しにくく、さらに、他の液晶材料との相溶性に優れた液晶性化合物、これを含む液晶組成物および該液晶組成物を用いて構成した液晶表示素子を提供する。

一般式(1)で表される液晶性化合物、この液晶性化合物を含む液晶組成物、およびこの液晶組成物を用いて構成した液晶表示素子。



PCTに基づいて公開される国際出願のパンフレット第一頁に掲載されたPCT加盟国を同定するために使用されるコード (参考情報)

AL	アルバニア	FI	フィンランド	LT	リトアニア	SN	セネガル
AM	アルメニア	FR	フランス	LU	ルクセンブルグ	SZ	スワジランド
AT	オーストリア	GB	英国	LV	ラトヴィア	TD	チャード
AU	オーストラリア	GE	グルジア	MC	モナコ	TG	トーゴ
AZ	アゼルバイジャン	GH	ガーナ	MD	モルドヴァ	TJ	タジキスタン
BA	ボスニア・ヘルツェゴビナ	GN	ギニア	MG	マダガスカル	TM	トルクメニスタン
BB	バルバドス	GW	ギニア・ビサウ	MK	マケドニア旧ユーゴスラヴィア共和国	TR	トルコ
BE	ベルギー	GR	ギリシャ	ML	マリ	TT	トリニダード・トバゴ
BG	ブルガリア	HU	ハンガリー	MN	モンゴル	UG	ウガンダ
BJ	ベナン	ID	インドネシア	MR	モーリタニア	US	米国
BR	ブラジル	IE	アイルランド	MW	マラウイ	UZ	ウズベキスタン
BY	ベラルーシ	IL	イスラエル	MX	メキシコ	VN	ヴェトナム
CA	カナダ	IS	アイスランド	NE	ニジェール	YU	ユーゴスラヴィア
CC	中央アフリカ共和国	IT	イタリア	NL	オランダ	ZW	ジンバブエ
CG	コンゴ	JP	日本	NO	ノルウェー		
CH	スイス	KE	ケニア	NZ	ニュージーランド		
CI	コートジボワール	KG	キルギス	PL	ポーランド		
CM	カメルーン	KP	北朝鮮	PT	ポルトガル		
CN	中国	KR	韓国	RO	ルーマニア		
CU	キューバ	KZ	カザフスタン	RU	ロシア		
CY	キプロス	LC	セントルシア	SD	スーダン		
CZ	チェコ	LI	リヒテンシュタイン	SE	スウェーデン		
DE	ドイツ	LK	スリランカ	SG	シンガポール		
DK	デンマーク	LS	レソト	SI	スロベニア		
EE	エストニア			SK	スロバキア		
ES	スペイン			SL	シエラ・レオネ		

明 細 書

負の誘電率異方性値を有する液晶性化合物、液晶組成物および液晶表示素子
技術分野

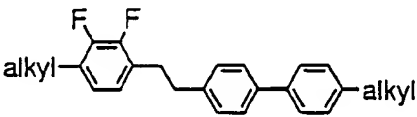
- 5 本発明は、新規液晶性化合物および液晶組成物に関し、さらに詳しくは、フッ素置換-1,4-フェニレン基を有する液晶性化合物、この化合物を含有する液晶組成物、およびこの液晶組成物を用いて構成した液晶表示素子に関する。

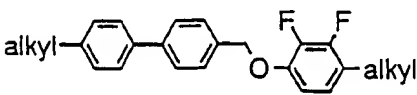
背景技術

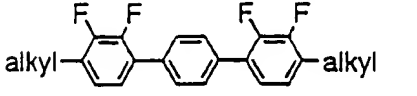
- 10 液晶性化合物（本願において、液晶性化合物なる用語は、液晶相を示す化合物および液晶相を示さないが液晶組成物の構成成分として有用である化合物の総称として用いられる。）を用いた表示素子は、時計、電卓、ワープロ等のディスプレイに広く利用されている。近年では、安価に視野角特性を改善することができるインプレーンスイッチング（IPS）方式およびヴァーティカルアラインメント（VA）方式の研究が盛んに行われている。

- 15 IPS方式およびVA方式用の液晶組成物では、負の誘電率異方性値を有するものが好適であり、さらに、高い電圧保持率および低いしきい値電圧を有し、それらの温度依存性が小さく、広い液晶相温度範囲を有し、他の液晶材料との相溶性に優れ、低粘性であること等の物性が求められている。

このような液晶組成物の成分として側方位がフッ素置換された液晶性化合物が数多く検討され、例えば、下記の化合物が開示された文献がある。

- 20
- 

1) (特開平 2-4725)
- 

2) (特開平 4-54146)
- 25
- 

3) (DE 3839213A1)

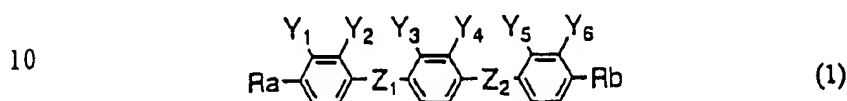
しかしながら、1)の化合物はしきい値電圧が高く、2)および3)の化合物は等方相転移温度が低い、あるいはスメクチック相を示しやすく、液晶組成物の成分として使用した場合、特に低温下で安定なネマチック相を形成し難い等の問

題点を有していた。

発明の開示

本発明の目的は、前記の要求特性に鑑み、負の誘電率異方性値を示すと共に極めて高い電圧保持率および低いしきい値電圧を有し、また、それらの温度依存性が極めて小さく、スメクチック相を示しにくく、さらに、他の液晶材料との相溶性に優れた液晶性化合物、これを含有する液晶組成物および該液晶組成物を用いて構成した液晶表示素子を提供することにある。

本発明者らは、上記課題の解決のため鋭意研究の結果、一般式(1)



(式中、R a および R b は各々独立して炭素数 1 ~ 20 の直鎖または分岐アルキル基を示し、これらの基中の相隣接しない任意のメチレン基(−CH₂−)は酸素原子で置換されていてもよく；Y₁、Y₂、Y₃、Y₄、Y₅およびY₆は各々独立して水素原子またはフッ素原子を示すが、Y₁、Y₂、Y₃、Y₄、Y₅およびY₆のうち少なくとも3つはフッ素原子を示し；Z₁およびZ₂は各々独立して−(CH₂)₂−、−(CH₂)₄−、−CH₂O−、−(CH₂)₃O−および単結合を示し、ただし、Z₁およびZ₂が共に単結合であることはなく；また、この化合物を構成する原子はいずれもその同位体で置換されていてもよい。)で表される液晶性化合物が所期の性能を有することを知り本発明を完成するに至った。

一般式(1)で表される化合物の一部は、前記先行文献1)および3)の請求の範囲等に形式的には包含されるが、これらの先行文献には本発明の化合物に関して、物性値等のデータが一切記載されておらず、その特性について具体的な言及もなく、本発明の有用性を示唆するものではなかった。

25 一般式(1)で表される化合物は下記の(a-1)~(a-24)のように類別される。

式中、R a および R b は前記と同様の意味を示し、Bは環上の1つ以上の水素原子がフッ素原子で置換されていてもよい1, 4-フェニレン基を示す。



	$Ra-B-(CH_2)_4-B-B-Rb$	(a-2)
	$Ra-B-CH_2O-B-B-Rb$	(a-3)
	$Ra-B-OCH_2-B-B-Rb$	(a-4)
	$Ra-B-(CH_2)_3O-B-B-Rb$	(a-5)
5	$Ra-B-O(CH_2)_3-B-B-Rb$	(a-6)
	$Ra-B-(CH_2)_2-B-(CH_2)_2-B-Rb$	(a-7)
	$Ra-B-(CH_2)_2-B-(CH_2)_4-B-Rb$	(a-8)
	$Ra-B-(CH_2)_4-B-(CH_2)_4-B-Rb$	(a-9)
	$Ra-B-(CH_2)_2-B-CH_2O-B-Rb$	(a-10)
10	$Ra-B-(CH_2)_2-B-OCH_2-B-Rb$	(a-11)
	$Ra-B-(CH_2)_2-B-(CH_2)_3O-B-Rb$	(a-12)
	$Ra-B-(CH_2)_2-B-O(CH_2)_3-B-Rb$	(a-13)
	$Ra-B-(CH_2)_4-B-CH_2O-B-Rb$	(a-14)
	$Ra-B-(CH_2)_4-B-OCH_2-B-Rb$	(a-15)
15	$Ra-B-(CH_2)_4-B-(CH_2)_3O-B-Rb$	(a-16)
	$Ra-B-(CH_2)_4-B-O(CH_2)_3-B-Rb$	(a-17)
	$Ra-B-CH_2O-B-CH_2O-B-Rb$	(a-18)
	$Ra-B-CH_2O-B-OCH_2-B-Rb$	(a-19)
	$Ra-B-OCH_2-B-CH_2O-B-Rb$	(a-20)
20	$Ra-B-CH_2O-B-(CH_2)_3O-B-Rb$	(a-21)
	$Ra-B-CH_2O-B-O(CH_2)_3-B-Rb$	(a-22)
	$Ra-B-OCH_2-B-O(CH_2)_3-B-Rb$	(a-23)
	$Ra-B-OCH_2-B-O(CH_2)_3-B-Rb$	(a-24)

式(a-1)～(a-24)で示される化合物は、いずれも好ましい特性を示すものであるが、これらの一群の中でより好ましい特性を示すものとして(a-1)～(a-4)、(a-10)および(a-11)を示すことができる。

式中、RaおよびRbは炭素数1～20の直鎖または分岐アルキル基であるが、具体的には直鎖アルキル基としてはメチル、エチル、プロピル、ブチル、ペンチル、ヘキシル、ヘプチル、デシル、ペンタデシル、イコシル等を、また分岐アル

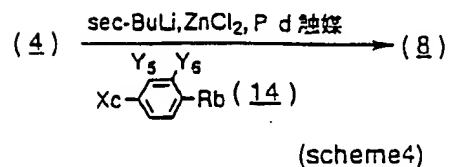
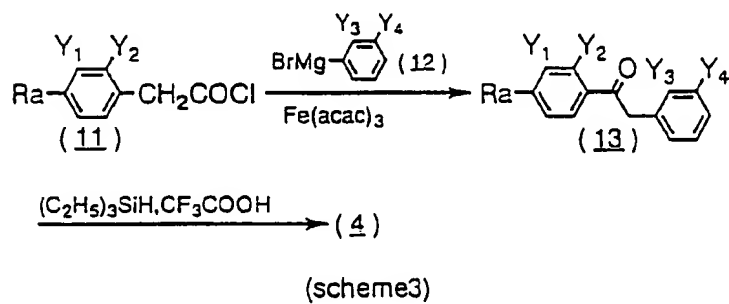
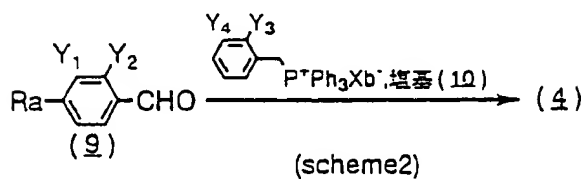
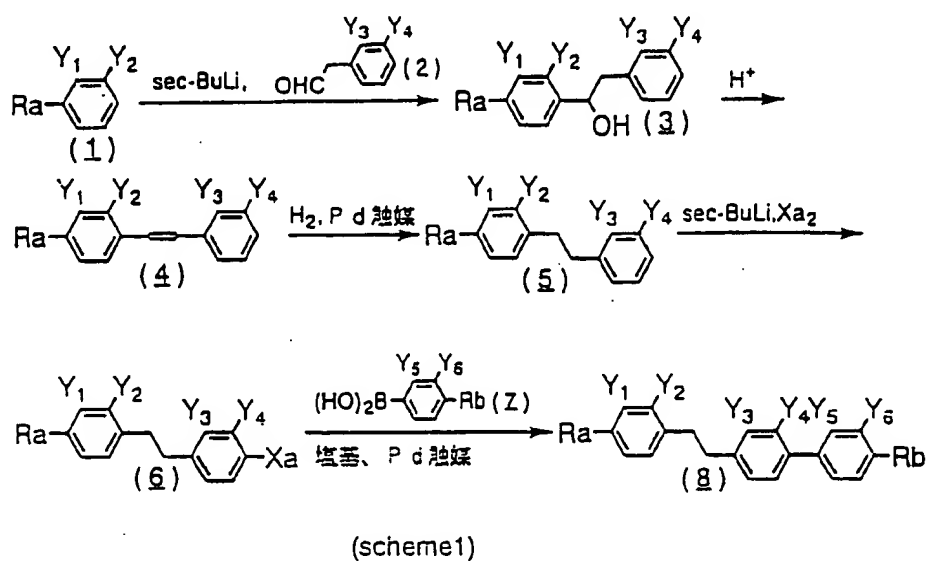
キル基としてはイソプロピル、sec-ブチル、tert-ブチル、2-メチル
ブチル、イソペンチル、イソヘキシル、3-エチルオクチル、3, 8-ジメチル
テトラデシル、5-エチル-5-メチルノナデシル等を例示することができる。
なお、分岐アルキル基は光学活性を示すものであってもよく、そのような化合物
5 はキラルドーパ剤として有用である。

また、これらのアルキル基中の相隣接しない任意のメチレン基は酸素原子で置
換されていてもよく、具体的には、メトキシ、エトキシ、プロポキシ、ブトキシ、
ペンチルオキシおよびノニルオキシ等のアルコキシ基、メトキシメチル、メトキ
シエチル、メトキシプロピル、メトキシブチル、メトキシペンチル、メトキシオ
10 クチル、エトキシメチル、エトキシエチル、エトキシプロピル、エトキシヘキシ
ル、プロポキシメチル、プロポキシエチル、プロポキシプロピル、プロポキシペ
ンチル、ブトキシメチル、ブトキシエチル、ブトキシブチル、ペンチルオキシメ
チル、ペンチルオキシブチル、ヘキシルオキシメチル、ヘキシルオキシエチル、
ヘキシルオキシプロピル、ヘプチルオキシメチルおよびオクチルオキシメチル等
15 のアルコキシアルキル基等を例示することができる。

本発明の一般式(1)で示される液晶性化合物は、一般的な有機合成法によっ
て製造することができるが、例えば以下のような方法で簡便に製造することがで
きる。

20

25



(式中、R a、R bおよびY₁～Y₆は前記と同様の意味を示し、X a～X cはハロゲン原子を示す。)

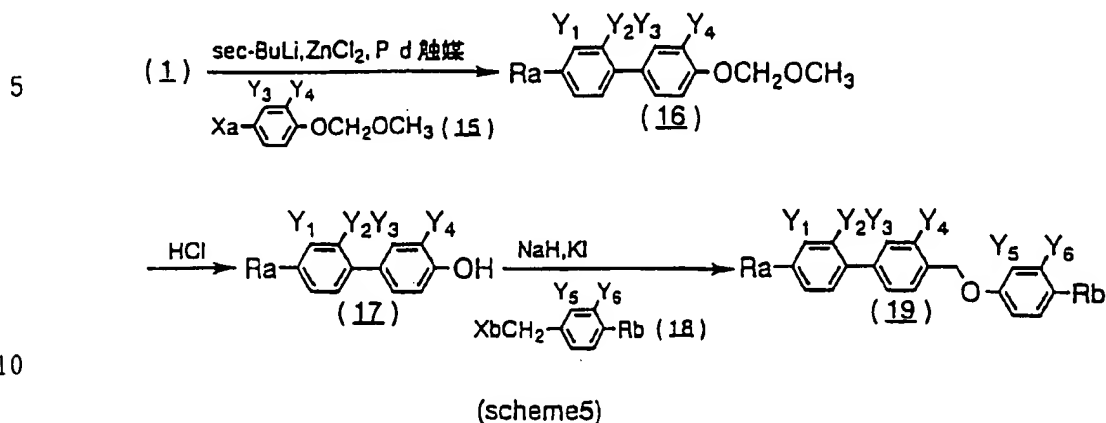
すなわち、scheme 1に示すごとく、化合物(1)とn-ブチルリチウムまたはsec-ブチルリチウム(sec-BuLi)等のリチウム化合物(あるいは、対応するGrignard試薬を用いてもよい。)および化合物(2)と反応させて化合物(3)を得る。p-トルエンスルホン酸等の酸触媒存在下、トルエンまたはキシレン等の溶媒中で脱水した後、パラジウム触媒またはラネーニッケル等の存在下、水素添加することにより化合物(5)を得る。化合物(5)とn-ブチルリチウムまたはsec-ブチルリチウム等のリチウム化合物、およびハロゲン分子(特に臭素またはヨウ素)と反応させることにより化合物(6)を得る。次いで、トルエンあるいはキシレン等とエタノール等のアルコール類および水の混合溶媒中、K₂CO₃あるいはNa₂CO₃等の塩基および炭素担持パラジウム(Pd-C)、Pd(PPh₃)₄、PdCl₂(PPh₃)₂等の触媒存在下、化合物(6)とジヒドロキシボラン誘導体(7)とを反応(M. HIRD等, リキッド クリスタルズ, 18(1), 1(1995))させることにより本発明の化合物(8)を製造することができる。

あるいは、scheme 2に示すごとく、化合物(9)と化合物(10)とのWittig反応(オーガニック リアクションズ, 第14巻, 第3章)から化合物(4)を得た後、scheme 1と同様にして本発明の化合物(8)を製造することもできる。

scheme 3に示すごとく、化合物(11)と化合物(12)を反応(C. Cardellio等, テトラヘドロン レターズ, 28(18), 2053(1987))させて化合物(13)とし、次いで、ヒドロシラン(C. T. West等, ザ ジャーナル オブ オーガニック ケミストリー, 38, 2675(1973))等による還元反応を行い、化合物(4)を得た後、scheme 1と同様にして本発明化合物の(8)を製造することもできる。

scheme 4に示すごとく、化合物(4)とn-ブチルリチウムまたはsec-ブチルリチウム等のリチウム化合物、およびZnCl₂またはZnBr₂等の亜鉛化合物とを反応させた後、化合物(14)とカップリング(林等, ザ ジャ

ーナル オブ ジ アメリカン ケミカル ソサイエティー, 106, 158
(1984)) させることによって本発明の化合物(8)を製造することが
きる。

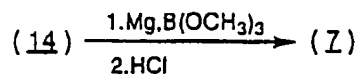


また、scheme 5 に示すごとく、化合物(1)とメチルまたはメトキシメ
チル基等の保護基で保護されたフェノール誘導体(15)とのカップリング反応
から化合物(16)を得た後、脱保護して化合物(17)を得る。次いで、化
15 合物(17)と化合物(18)をナトリウムアミド(J. B. ライト等, ジャーナ
ル オブ ジ アメリカン ケミカル ソサイエティー, 70, 3098 (19
48))、炭酸カリウム(W. T. オルソン等, ジャーナル オブ ジ アメリ
カン ケミカル ソサイエティー, 69, 2451 (1947))、トリエチル
アミン(R. L. Merker等, ザ ジャーナル オブ オーガニック ケミ
20 ストリー, 26, 5180 (1961))、水酸化ナトリウム(C. Wilkins,
シンセシス, 1973, 156)、水酸化カリウム(J. Rebek等,
ザ ジャーナル オブ オーガニック ケミストリー, 44, 1485 (197
9))、水酸化バリウム(カワベ等, ザ ジャーナル オブ オーガニック ケ
ミストリー, 37, 4210 (1972))または水素化ナトリウム(NaH)
25 (C. J. Stark, テトラヘドロン レターズ, 22, 2089 (198
1))、K. タカイ等, テトラヘドロン レターズ, 21, 1657 (1980
)等の塩基の存在下、ジメチルスルホキシド、ジメチルホルムアミド、1, 2
-ジメトキシエタン、テトラヒドロフラン、ヘキサメチルリン酸トリアミドまた
はトルエン等の溶媒中で反応させることにより本発明の化合物(19)を製造す

ることができる。

一般式(1)において、R中に-O-を含む化合物も同様の方法で製造することができる。

原料であるジヒドロキシボラン誘導体(7)も公知の一般的な有機合成法によって製造することができるが、例えば以下のような方法で簡便に製造することができる。



(scheme6)

10

すなわち、scheme 6に示すごとく、ハロゲン化合物(14)とマグネシウムから調製したGrignard試薬とトリメトキシボランまたはトリイソプロピルオキシボラン等のトリアルコキシボランとを反応させた後、塩酸または硫酸等で加水分解することによってジヒドロキシボラン誘導体(7)を製造することができる。

15

上述の反応は全て公知のものであるが、必要によりさらに他の既知反応を使用できることは言うまでもない。

このようにして得られる本発明の液晶性化合物は、極めて高い電圧保持率および低いしきい値電圧を有し、それらの温度依存性が極めて小さく、スメクチック相を示しにくい。え、他の液晶材料との相溶性に優れている。また、これらの本発明液晶性化合物は、液晶表示素子が通常使用される条件下において物理的および化学的に十分安定であり、ネマチック液晶組成物の構成成分として極めて優れている。

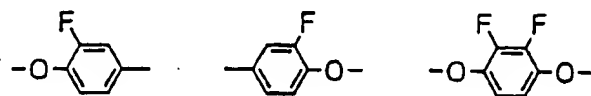
20

本発明の化合物は、TN、STNおよびTFT用の液晶組成物においても、その構成成分として好適に使用することができる。

25

一般式(1)で表される化合物は、比較的高い等方相転移温度と低粘性を示す。

また、以下の部分構造を有する化合物は、特に大きな負の誘電率異方性値を示す。



- 環構造中の水素原子をフッ素原子に置換することによって、より大きな誘電率
5 異方性値をとることが可能であり、同時に相溶性も改善され得る。

さらに、本発明化合物中の原子が、その同位体で置換された化合物も同様の特性を示すことから好ましいものといえる。

これらのことから環、側鎖、置換基および結合基を適当に選択することにより所望の物性を有する新たな液晶性化合物を得ることができる。

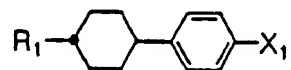
- 10 以下、本発明の液晶組成物に関して説明する。本発明に係る液晶組成物は、一般式(1)で表される化合物の少なくとも1種を0.1～99.9重量%の割合で含有することが、優良な特性を発現せしめるために好ましく、より好ましくはその割合は1～60重量%である。

- さらに詳しくは、本発明で提供される液晶組成物は、一般式(1)で表される
15 化合物を少なくとも1種含有する第一成分に加え、一般式(2)～(12)で表される化合物群から液晶組成物の目的に応じて選択される化合物を混合することにより完成する。

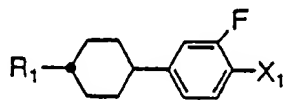
本発明の液晶組成物に用いられる一般式(2)～(4)で表される化合物の好ましい例として以下の化合物を挙げることができる。

20

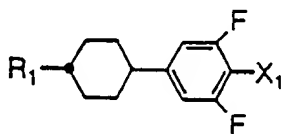
25



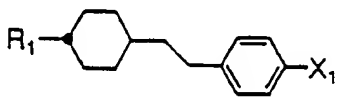
(2-1)



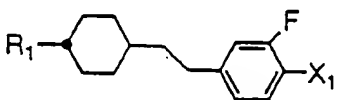
(2-2)



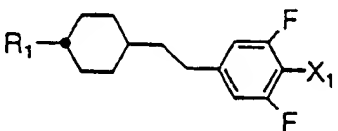
(2-3)



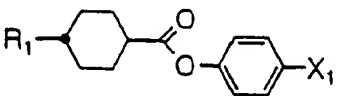
(2-4)



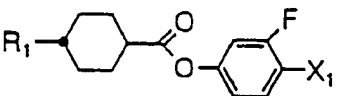
(2-5)



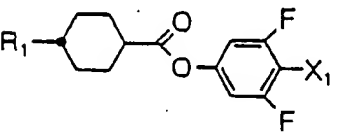
(2-6)



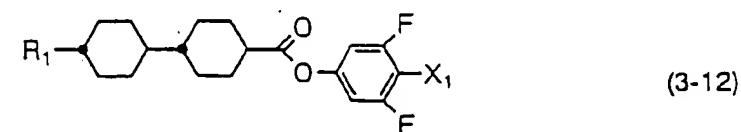
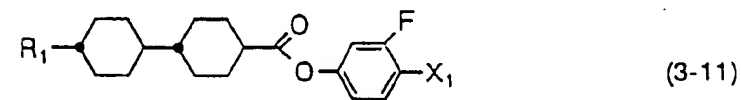
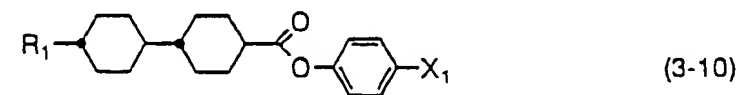
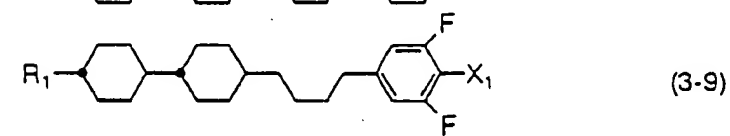
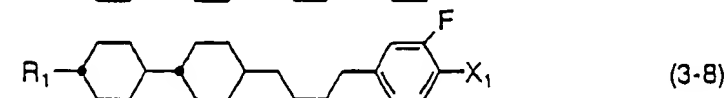
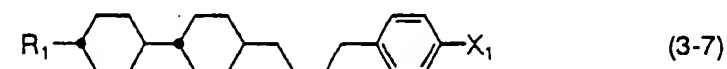
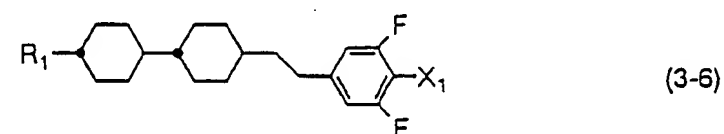
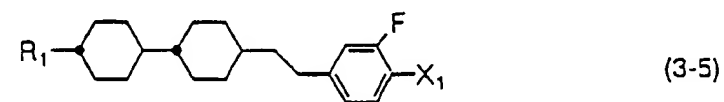
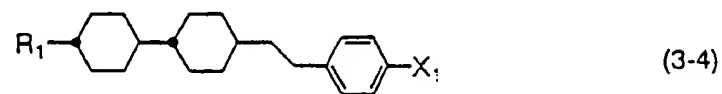
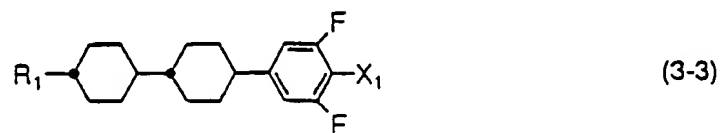
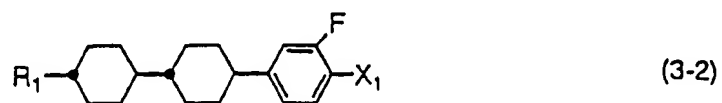
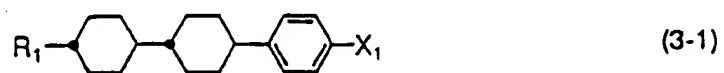
(2-7)

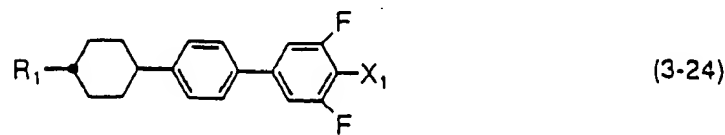
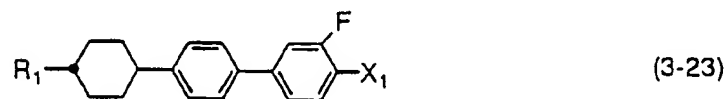
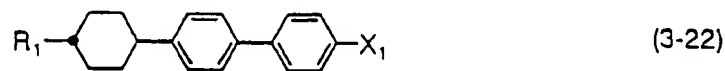
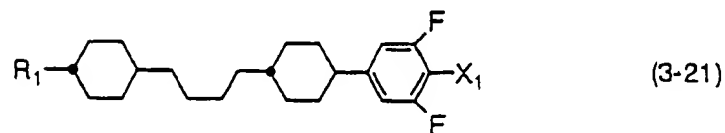
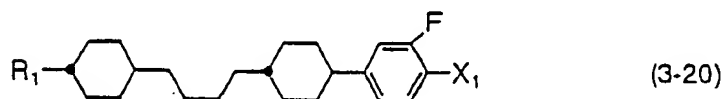
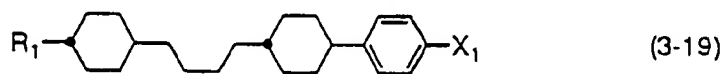
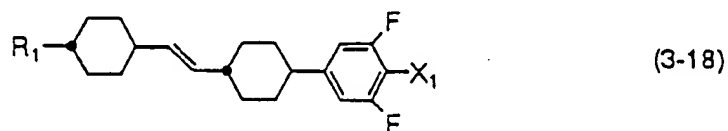
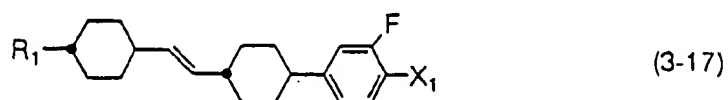
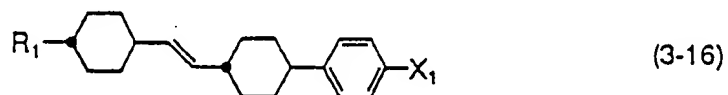
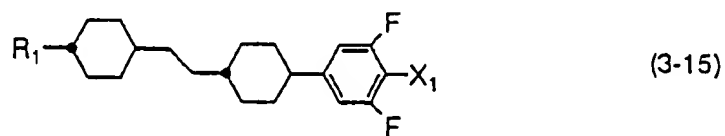
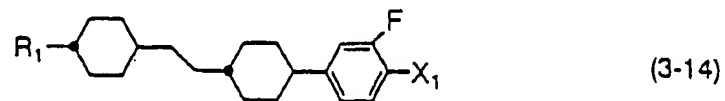
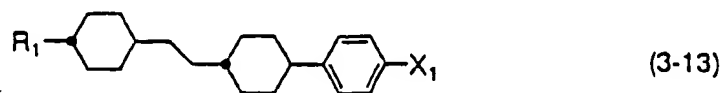


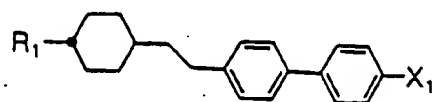
(2-8)



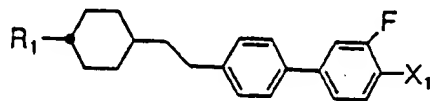
(2-9)



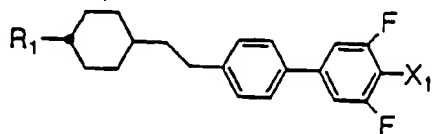




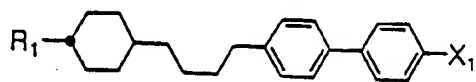
(3-25)



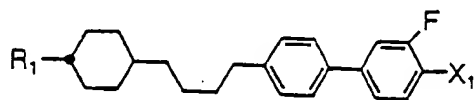
(3-26)



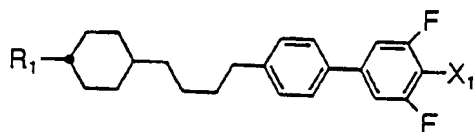
(3-27)



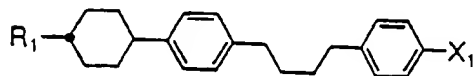
(3-28)



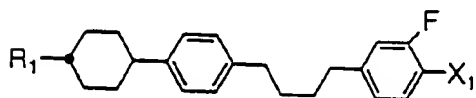
(3-29)



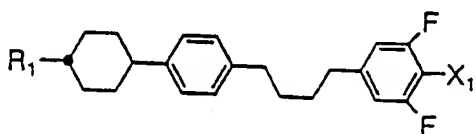
(3-30)



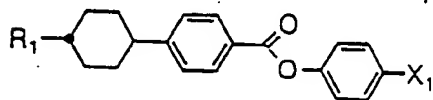
(3-31)



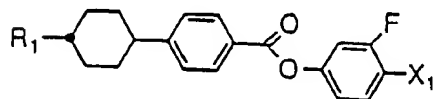
(3-32)



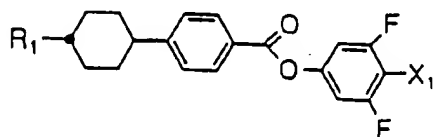
(3-33)



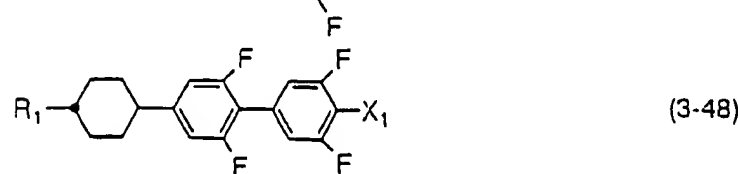
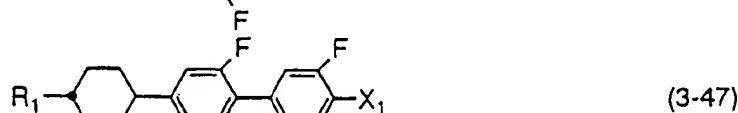
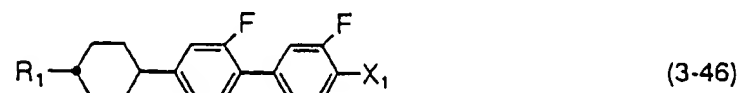
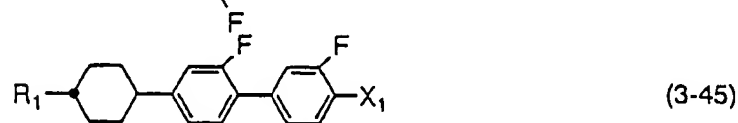
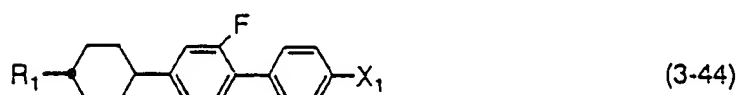
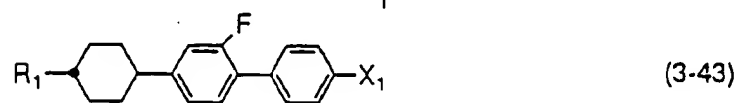
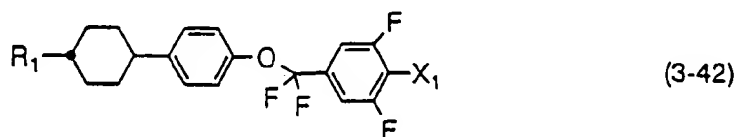
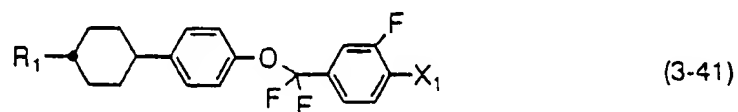
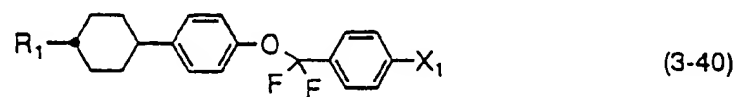
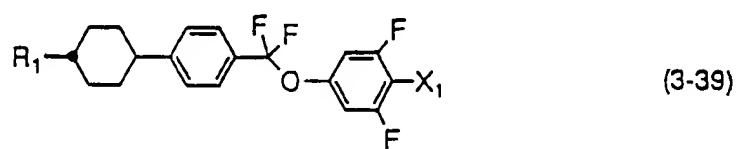
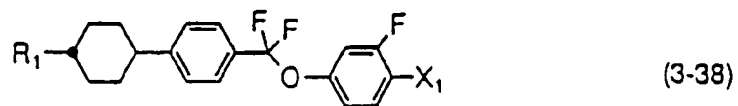
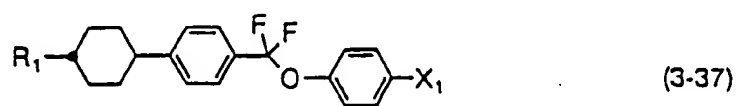
(3-34)

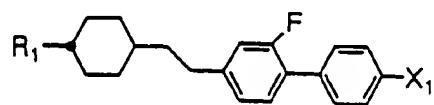


(3-35)

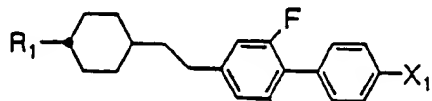


(3-36)

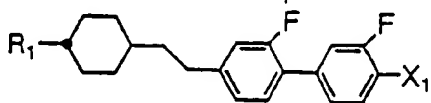




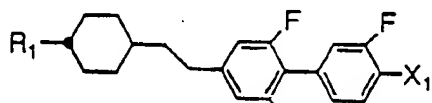
(3-49)



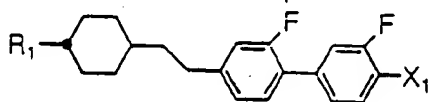
(3-50)



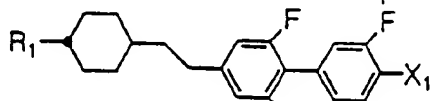
(3-51)



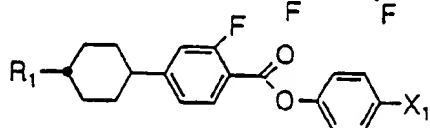
(3-52)



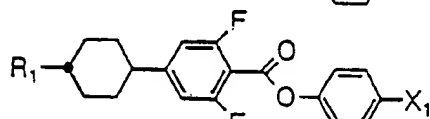
(3-53)



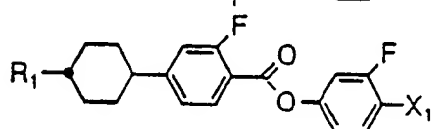
(3-54)



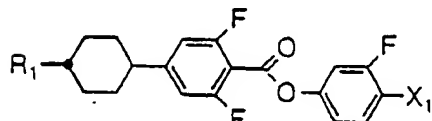
(3-55)



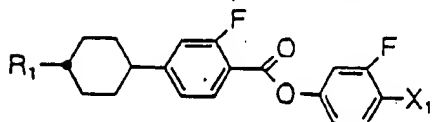
(3-56)



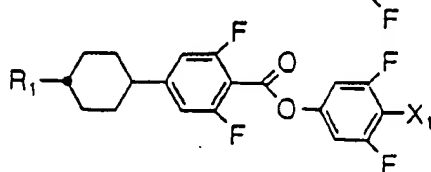
(3-57)



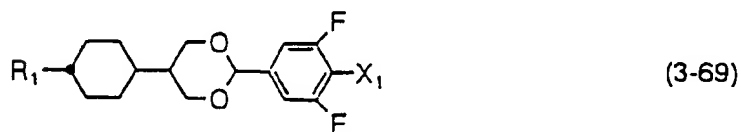
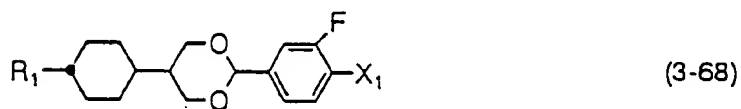
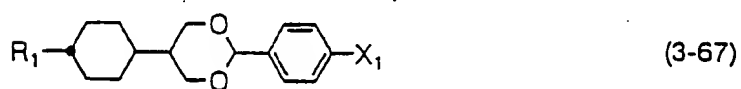
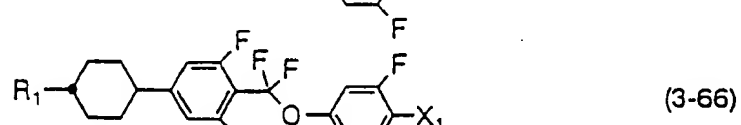
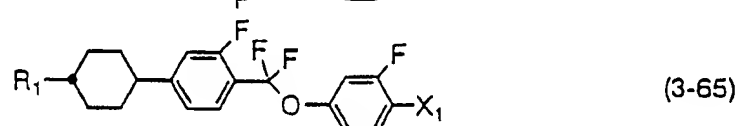
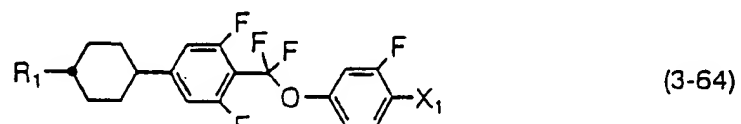
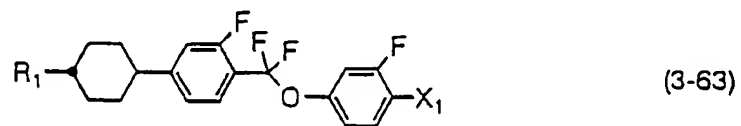
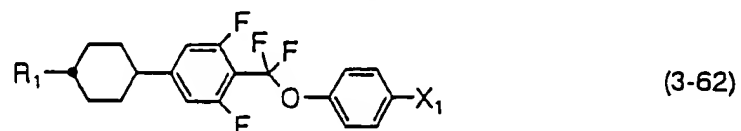
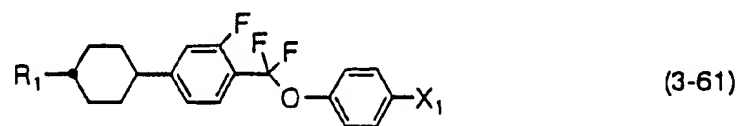
(3-58)

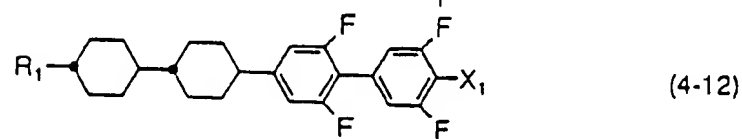
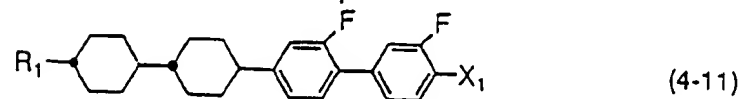
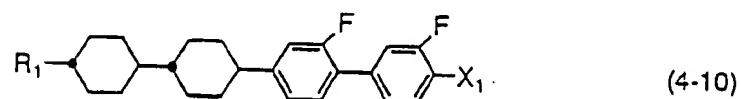
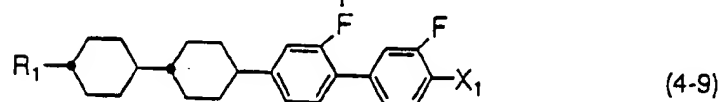
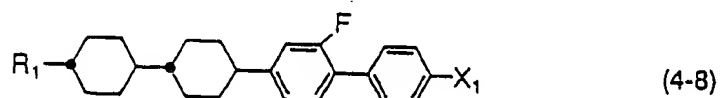
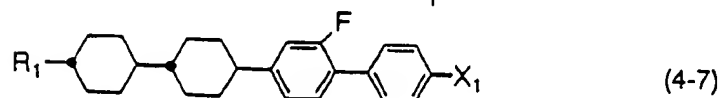
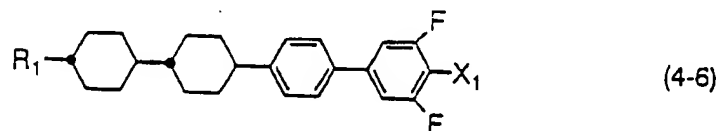
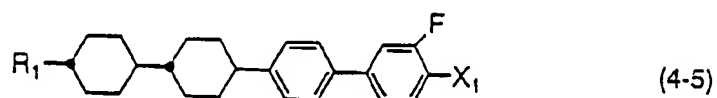
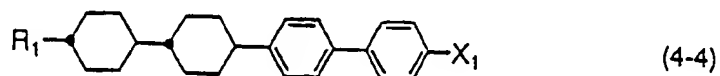
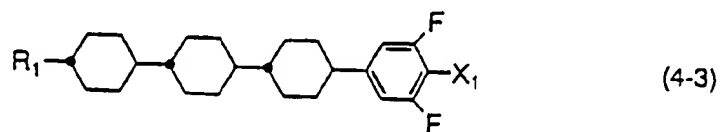
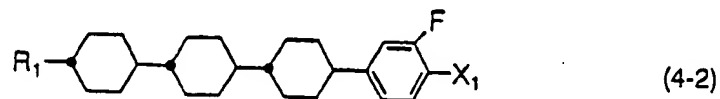
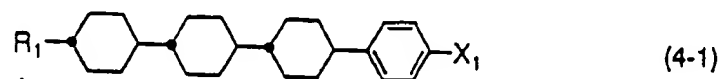


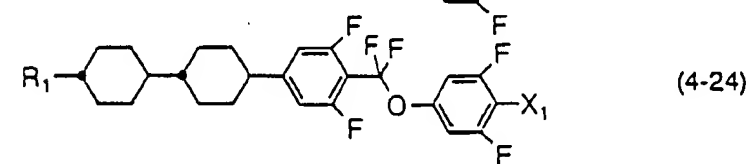
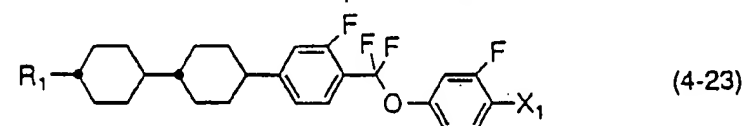
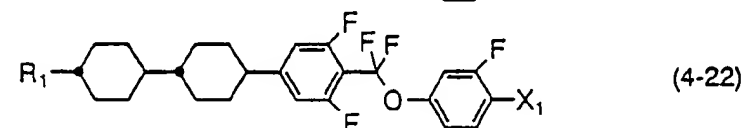
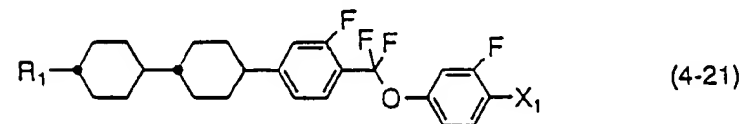
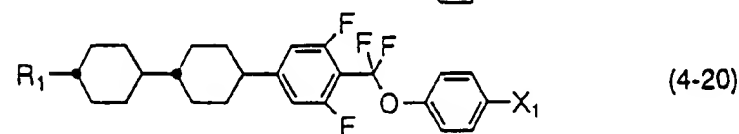
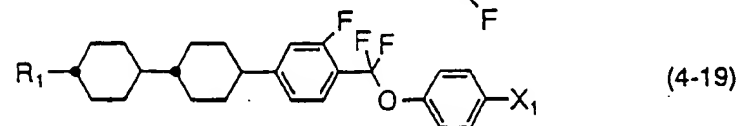
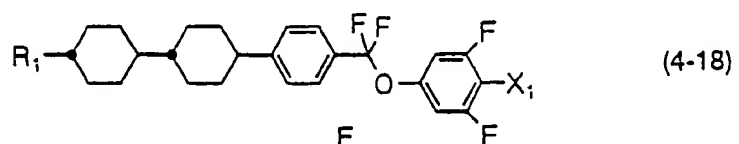
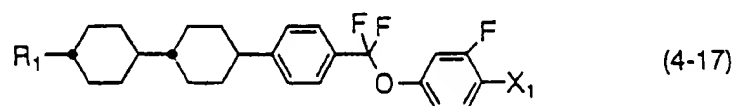
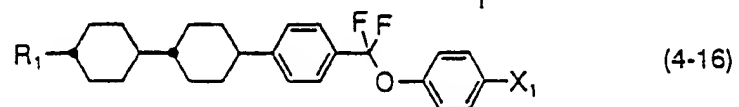
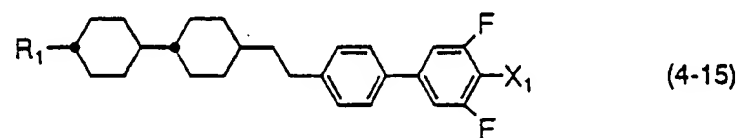
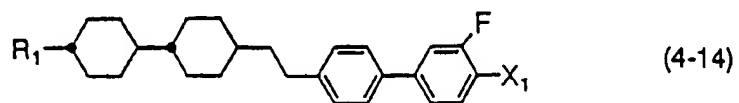
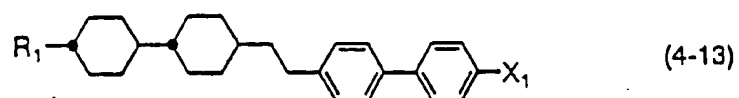
(3-59)



(3-60)







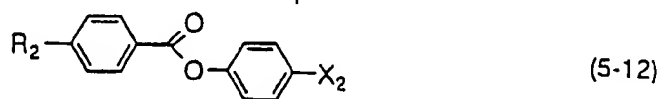
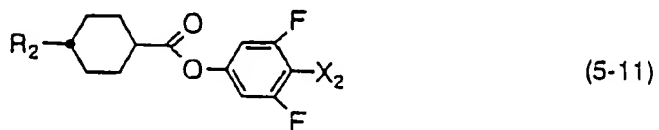
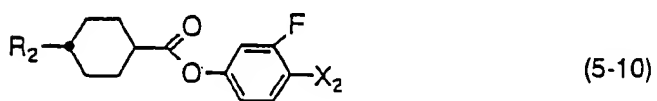
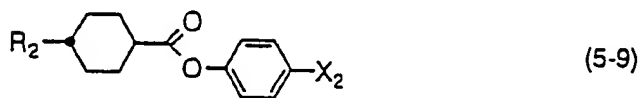
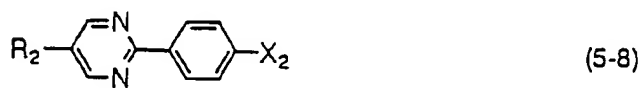
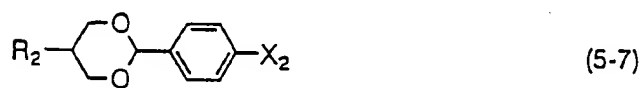
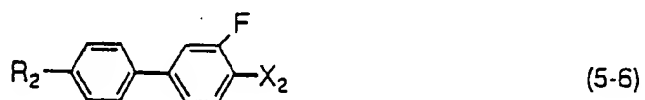
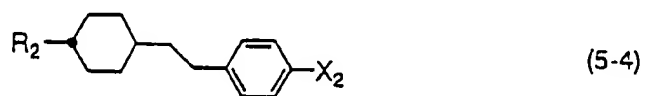
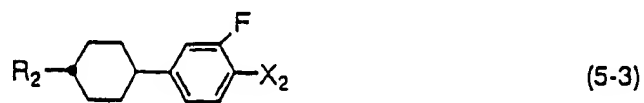
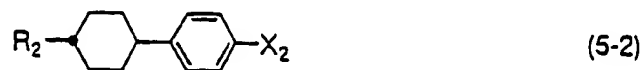
(式中、 R_1 および X_1 は前記と同様の意味を示す。)

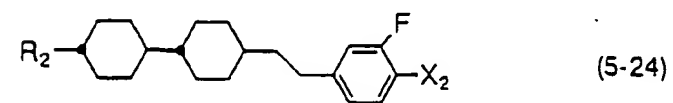
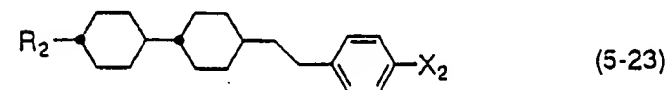
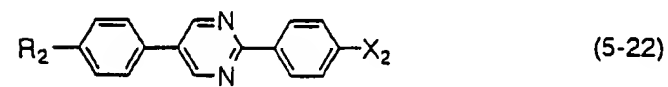
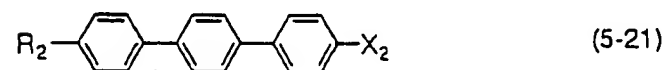
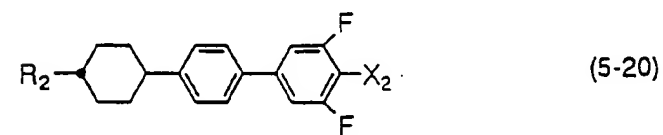
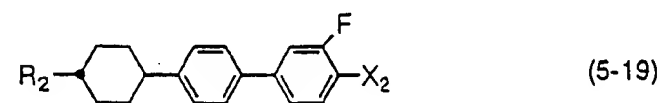
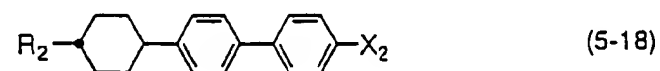
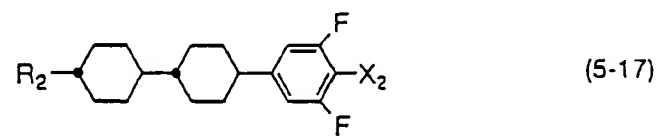
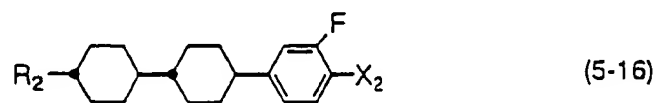
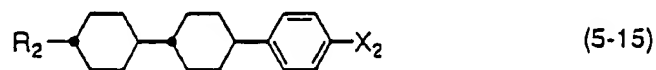
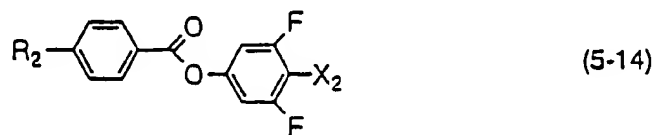
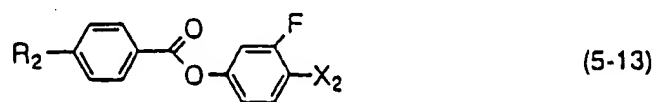
一般式(2)～(4)で表される化合物は誘電率異方性値が正の化合物であり、熱的安定性や化学的安定性が非常に優れており、特に電圧保持率の高い、あるいは比抵抗値の大きいといった高信頼性が要求されるTFT用の液晶組成物を調製する場合に、極めて有用な化合物である。

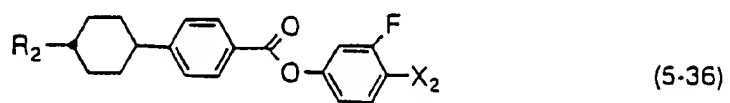
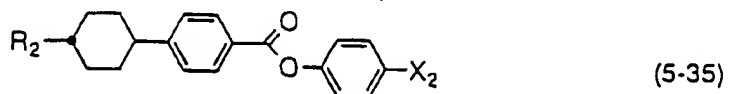
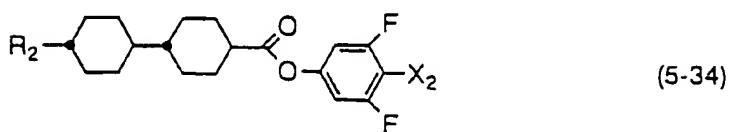
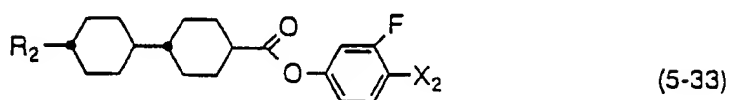
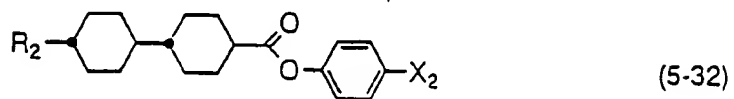
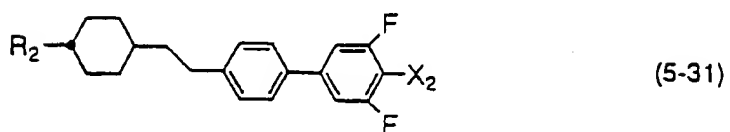
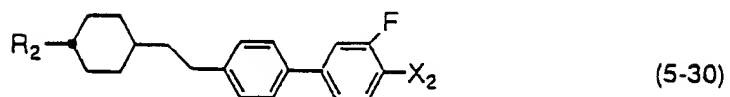
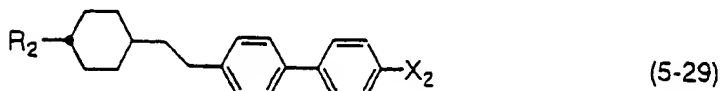
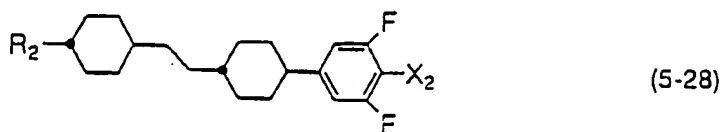
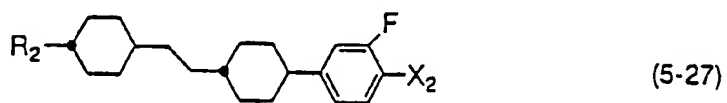
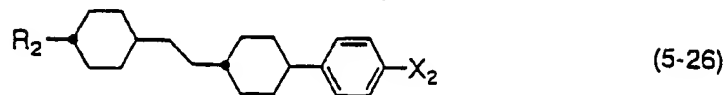
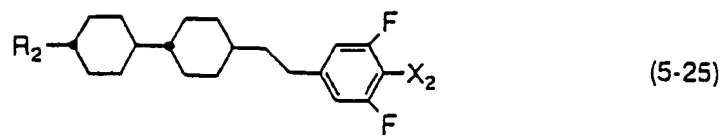
TFT用の液晶組成物を調製する場合、一般式(2)～(4)で表される化合物の使用量は、液晶組成物の全重量に対して0.1～99.9重量%の範囲で利用できるが、好ましくは10～97重量%、より好ましくは40～95重量%である。また、一般式(7)～(9)で表される化合物を、粘度調整の目的でさらに含有してもよい。

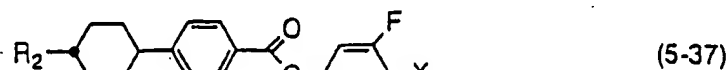
STNまたはTN用の液晶組成物を調製する場合も一般式(2)～(4)で表される化合物を使用することができるが、50重量%以下の使用量が好ましい。

本発明の液晶組成物に用いられる一般式(5)および(6)で表される化合物の好ましい例として以下の化合物を挙げることができる。

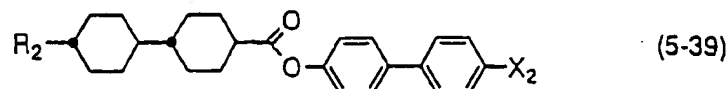
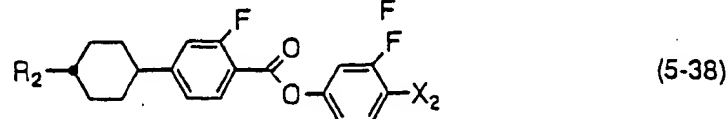




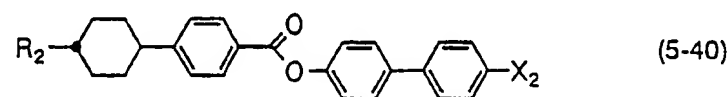




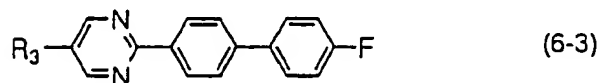
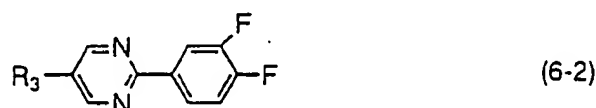
5



10



15



(式中、 R_2 、 R_3 および X_2 は前記と同様の意味を示す。)

20 一般式(5)および(6)で表される化合物は誘電率異方性値が正でその値が大きく、特に液晶組成物のしきい値電圧を小さくする目的で使用される。また、屈折率異方性値の調整、透明点を高くする等のネマチックレンジを広げる目的にも使用される。さらに、STNまたはTN用の液晶組成物の電圧-透過率特性の急峻性を改良する目的にも使用される。

25 一般式(5)および(6)で表される化合物は、STNおよびTN用の液晶組成物を調製する場合には、特に有用な化合物である。

液晶組成物中に一般式(5)および(6)で表される化合物の量が増加すると、液晶組成物のしきい値電圧は小さくなるが、粘度が上昇する。したがって、液晶組成物の粘度が要求値を満足している限り、多量に使用した方が低電圧駆動でき

るので有利である。STNまたはTN用の液晶組成物を調製する場合に、一般式(5)および(6)で表される化合物の使用量は0.1～99.9重量%の範囲で利用できるが、好ましくは10～97重量%、より好ましくは40～95重量%である。

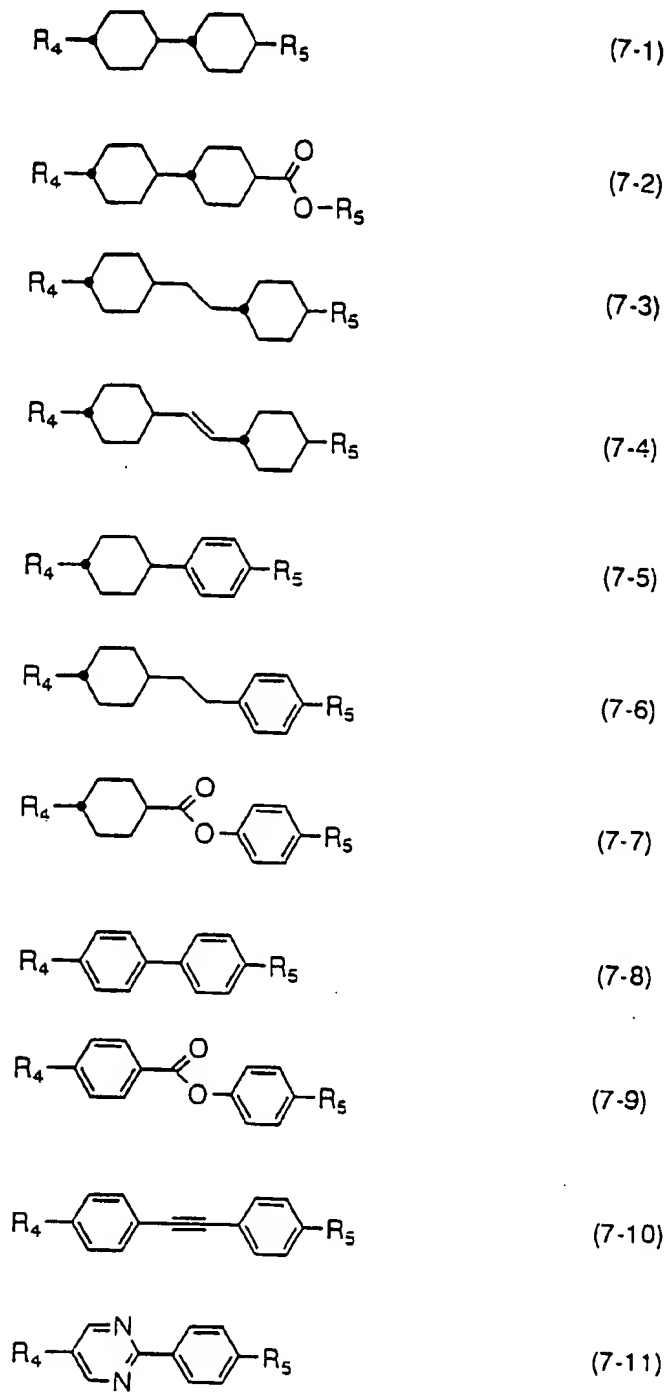
- 5 本発明の液晶組成物に用いられる一般式(7)～(9)で表される化合物の好ましい例として以下の化合物を挙げることができる。

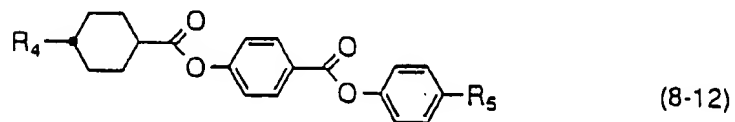
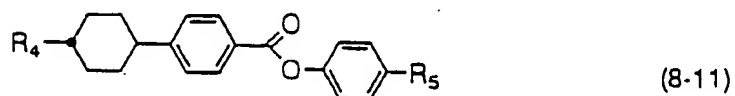
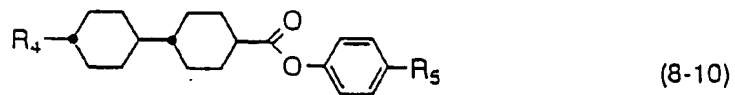
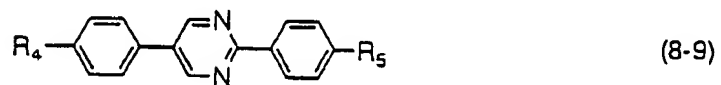
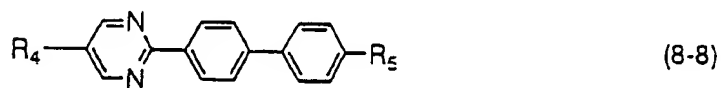
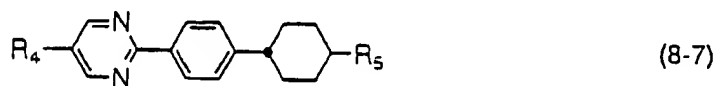
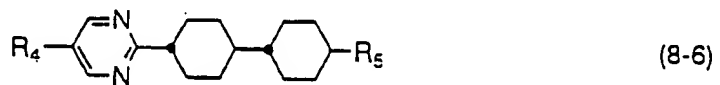
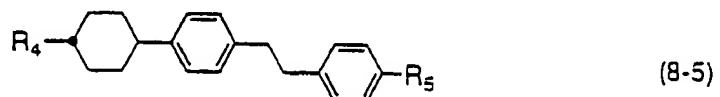
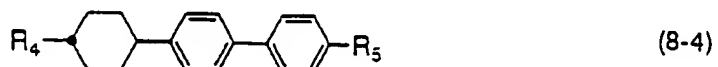
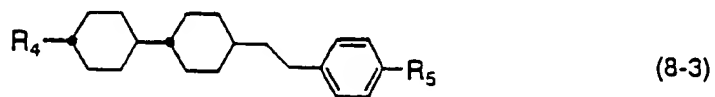
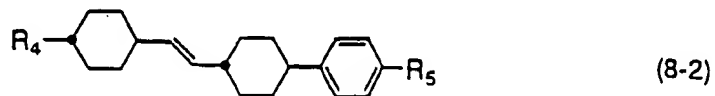
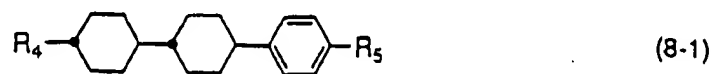
10

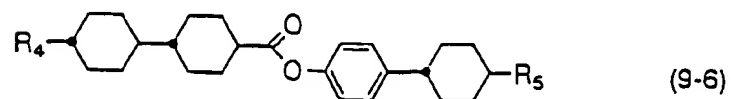
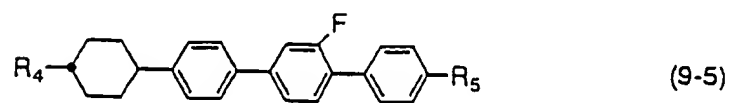
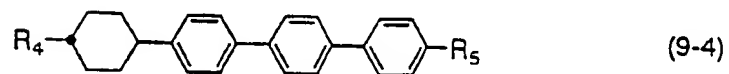
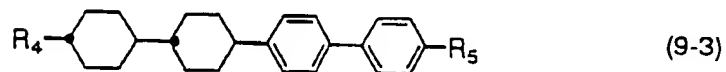
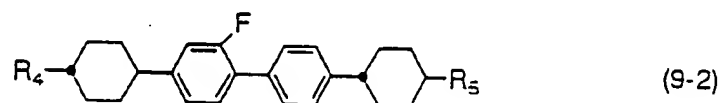
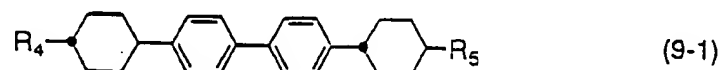
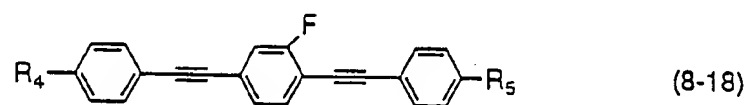
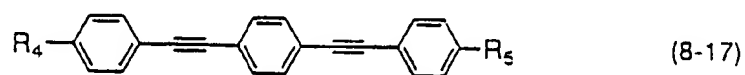
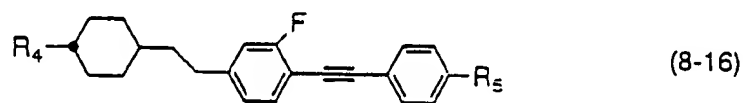
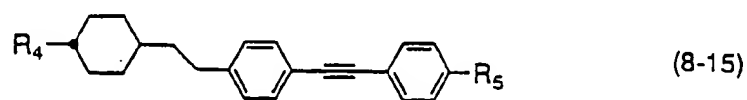
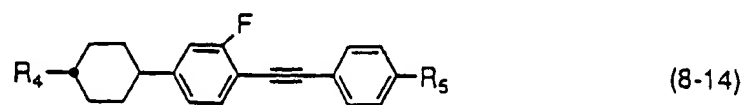
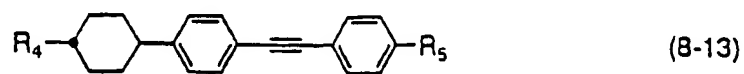
15

20

25





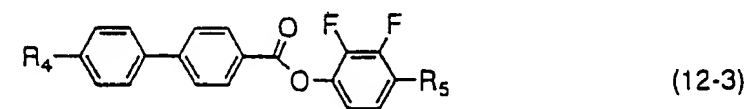
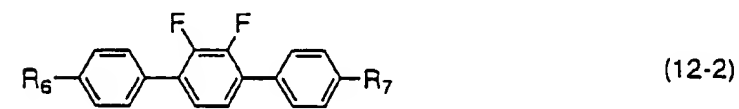
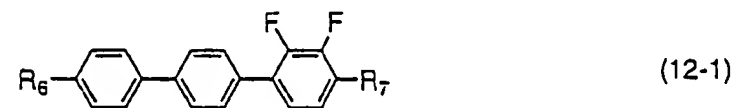
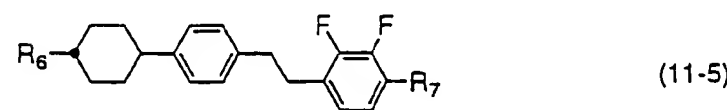
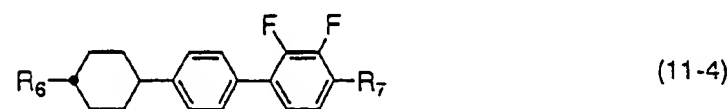
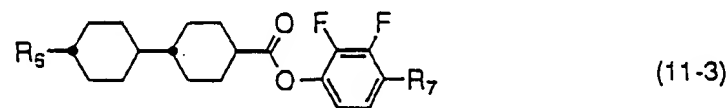
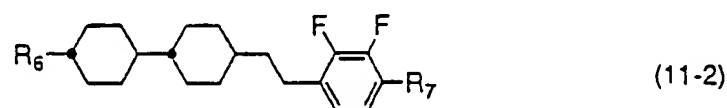
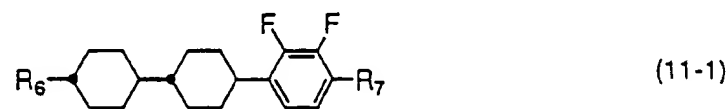
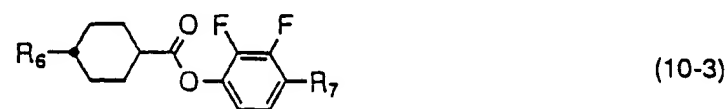


(式中、 R_4 および R_5 は前記と同様の意味を示す。)

一般式(7)～(9)で表される化合物は、誘電率異方性の絶対値が小さく、中性に近い化合物である。一般式(7)で表される化合物は主として粘度調整または屈折率異方性値の調整の目的で使用される。また、一般式(8)および(9)で表される化合物は透明点を高くする等のネマチックレンジを広げる目的または屈折率異方性値の調整の目的で使用される。

一般式(7)～(9)で表される化合物の使用量を増加させると液晶組成物のしきい値電圧が大きくなり、粘度が小さくなる。したがって、液晶組成物のしきい値電圧が要求値を満足している限り、多量に使用することが望ましい。TF T用の液晶組成物を調製する場合に、一般式(7)～(9)で表される化合物の使用量は、好ましくは40重量%以下、より好ましくは35重量%以下である。また、STNまたはTN用の液晶組成物を調製する場合には、一般式(7)～(9)で表される化合物の使用量は、好ましくは70重量%以下、より好ましくは60重量%以下である。

本発明の液晶組成物に用いられる一般式(10)～(12)で表される化合物の好ましい例として以下の化合物を挙げることができる。



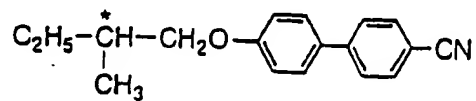
(式中、 R_6 および R_7 は前記と同様の意味を示す。)

一般式(10)～(12)で表される化合物は、誘電率異方性値が負の化合物である。一般式(10)で表される化合物は2環化合物であるので、主としてしきい値電圧の調整、粘度調整または屈折率異方性値の調整の目的で使用される。

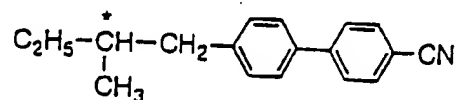
- 5 一般式(11)で表される化合物は透明点を高くする等のネマチックレンジを広げる目的または屈折率異方性値の調整の目的で使用される。一般式(12)の化合物はネマチックレンジを広げる目的の他、しきい値電圧を小さくする目的および屈折率異方性値を大きくする目的で使用される。

- 10 一般式(10)～(12)で表される化合物は主として誘電率異方性値が負である液晶組成物に使用される。その使用量を増加させると組成物のしきい値電圧が小さくなるが、粘度が大きくなる。したがって、しきい値電圧の要求値を満足している限り、少なく使用することが望ましい。しかしながら、誘電率異方性値の絶対値が5以下であるので、40重量%より少なくなると電圧駆動ができなくなる場合がある。一般式(10)～(12)で表される化合物の使用量は、誘電率異方性値が負であるTFT用の組成物を調製する場合には40重量%以上が好ましいが、50～95重量%が好適である。また弾性定数をコントロールし、組成物の電圧-透過率曲線を制御する目的で、一般式(10)～(12)で表される化合物を誘電率異方性値が正である組成物に混合する場合もある。この場合の一般式(10)～(12)で表される化合物の使用量は30重量%以下が好ましい。
- 20

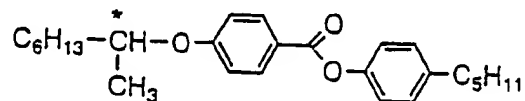
- また、本発明の液晶組成物では、OCB(Optically Compensated Birefringence)モード用液晶組成物等の特別な場合を除き、液晶組成物のらせん構造を誘起して必要なねじれ角を調整し、逆ねじれ(reverse twist)を防ぐ目的で、通常、光学活性化合物を添加する。このような目的で公知のいずれの光学活性化合物も使用できるが、好ましい例として以下の光学活性化合物を挙げることができる。
- 25



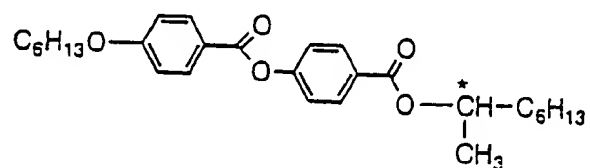
記号 : C 1 5



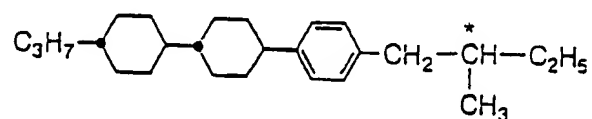
記号 : C B 1 5



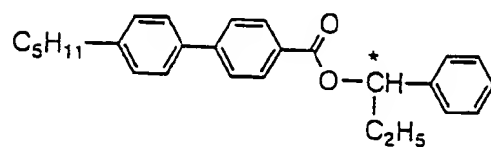
記号 : C M 2 1



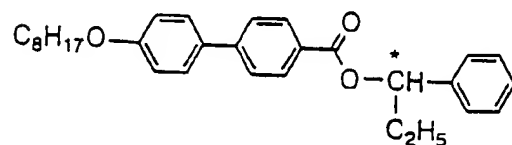
記号 : C M 3 3



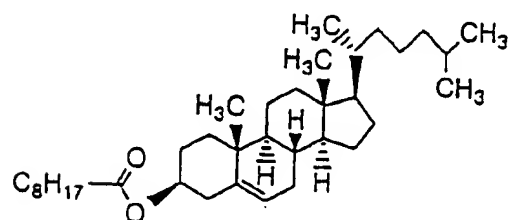
記号 : C M 4 3 L



記号 : C M 4 5



記号 : C M 4 7



記号 : C N

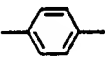
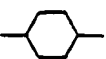
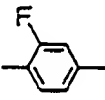
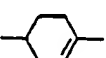
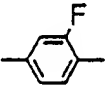
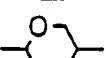
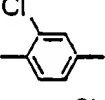
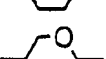
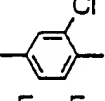
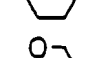
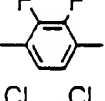
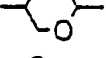
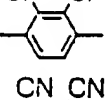
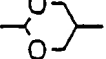
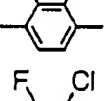
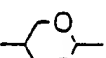
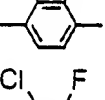
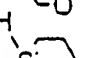
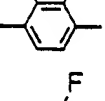
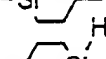
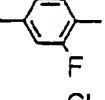
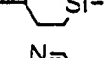
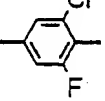
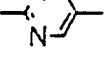
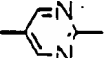
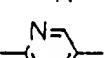
本発明の液晶組成物は、通常、これらの光学活性化合物を添加して、ねじれのピッチを調整する。ねじれのピッチは、TFT用およびTN用の液晶組成物であれば40～200 μm の範囲に調整するのが好ましい。STN用の液晶組成物であれば6～20 μm の範囲に調整するのが好ましい。また、双安定TN (Bistable TN) モード用の場合は、1.5～4 μm の範囲に調整するのが好ましい。また、ピッチの温度依存性を調整する目的で、2種以上の光学活性化合物を添加してもよい。

本発明の液晶組成物は、慣用な方法で調製される。一般には、種々の成分を高い温度で互いに溶解させる方法がとられている。

また、本発明の液晶組成物は、メロシアニン系、スチリル系、アゾ系、アゾメチン系、アゾキシ系、キノフタロン系、アントラキノ系、およびテトラジン系等の二色性色素を添加してゲストホスト (GH) モード用の液晶組成物としても使用できる。あるいは、ネマチック液晶をマイクロカプセル化して作製したNCAPや液晶中に三次元網目状高分子を作製したポリマーネットワーク液晶表示素子 (PNLCD) に代表されるポリマー分散型液晶表示素子 (PDLCD) 用の液晶組成物としても使用できる。その他、複屈折制御 (ECB) モードや動的散乱 (DS) モード用の液晶組成物としても使用できる。

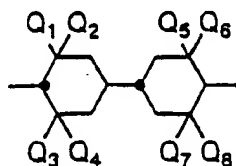
本発明の化合物を含有する液晶組成物例として以下のものを示すことができる。なお、組成物例および後述の実施例中の化合物は、以下に示される定義によって記号化して表記し、化合物のNo. は後述の実施例中に示されるそれと同一である。

左末端基 $R_a, R_1 \sim R_4, R_6$	記号
$C_aH_{2a+1}-$	a-
$C_aH_{2a+1}O-$	aO-
$C_aH_{2a+1}OC_bH_{2b}-$	aOb-
$C_aH_{2a+1}OC_bH_{2b}O-$	aObO-
$C_{a-1}H_{2(a-1)+1}C(C_bH_{2b+1})HC_cH_{2c}-$	a(b)c-
$CFH_2C_{a-1}H_{2(a-1)}-$	Fa-
$CF_2HC_{a-1}H_{2(a-1)}-$	FFa-
$CF_3C_{a-1}H_{2(a-1)}-$	FFFa-
$CFH_2C_{a-1}H_{2(a-1)}O-$	FaO-
$CFH_2C_{a-1}H_{2(a-1)}OC_bH_{2b}-$	FaOb-
$C_aH_{2a+1}CFHC_bH_{2b}-$	a(F)b-
$C_aH_{2a+1}CF_2C_bH_{2b}-$	a(FF)b-
$C_aH_{2a+1}SiH_2C_bH_{2b}-$	a(Si)b-
$C_aH_{2a+1}CH=CHC_bH_{2b}-$	aVb-
$C_aH_{2a+1}CH=CHC_bH_{2b}CH=CHC_cH_{2c}-$	aVbVc-
$C_aH_{2a+1}CH=CHC_bH_{2b}OC_cH_{2c}-$	aVbOc-
$C_aH_{2a+1}OC_bH_{2b}CH=CHC_cH_{2c}-$	aObVc-
$CFH_2C_{a-1}H_{2(a-1)}CH=CHC_bH_{2b}-$	FaVb-
$FFC=CHC_aH_{2a}-$	FFVa-
$F(CN)C=CHC_aH_{2a}-$	FCVa-
結合基 $Z_1 \sim Z_{10}$	記号
$-(CH_2)_a-$	a
$-CH_2O-$	CH ₂ O
$-OCH_2-$	OCH ₂
$-C_3H_6O-$	C ₃ H ₆ O
$-OC_3H_6-$	OC ₃ H ₆
$-COO-$	E
$-C \equiv C-$	T
$-CH=CH-$	V
$-CF_2O-$	CF ₂ O
$-OCF_2-$	OCF ₂

環構造	環B ~ 環M	記号	環構造	環B ~ 環M	記号
		B			H
		B(2F)			Ch
		B(3F)			P(2)
		B(2Cl)			P(3)
		B(3Cl)			D(2,5)
		B(2,3F)			D(1,6)
		B(2,3Cl)			D(3,5)
		B(2,3CN)			Si(1)
		B(2F,3Cl)			Si(4)
		B(2Cl,3F)			Py(1,6)
		B(3,5F)			Py(2,5)
		B(3F,5Cl)			Pr(2)
					Pr(3)
					Pr(3F)

	右末端基 R b, R ₅ , R ₇ , X ₁ , X ₂	記号
5	-F	-F
	-Cl	-Cl
	-CN	-C
	-CF ₃	-CF ₃
	-OCF ₃	-OCF ₃
10	-OCF ₂ H	-OCF ₂ H
	-CF ₂ CF ₂ H	-CF ₂ CF ₂ H
	-CF ₂ CH ₂ CF ₃	-CF ₂ CH ₂ CF ₃
	-CF ₂ CFHCF ₃	-CF ₂ CFHCF ₃
	-OCH ₂ CF ₂ H	-OCH ₂ CF ₂ H
15	-OCF ₂ CF ₂ H	-OCF ₂ CF ₂ H
	-OCF ₂ CH ₂ CF ₃	-OCF ₂ CH ₂ CF ₃
	-OCF ₂ CFHCF ₃	-OCF ₂ CFHCF ₃
	-C _w H _{2w+1}	-w
	-OC _w H _{2w+1}	-Ow
20	-C _w H _{2w} OC _x H _{2x+1}	-wOx
	-OC _w H _{2w} OC _x H _{2x+1}	-OwOx
	-C _{w-1} H _{2(w-1)} CFH ₂	-wF
	-C _w H _{2w} CH=CH ₂	-wV
	-C _w H _{2w} CH=CHC _x H _{2x+1}	-wVx
	-C _w H _{2w} CH=CHC _x H _{2x} CH=CH ₂	-wVxV
	-COOCH ₃	-EMe
	-C _w H _{2w} CH=CHC _{x-1} H _{2(x-1)} CFH ₂	-wVxF
	-CH=CF ₂	-VFF
	-C _w H _{2w} CH=CF ₂	-wVFF
	-C≡C-CN	-TC

また、例えば下記の部分構造式において、トランス-1, 4-シクロヘキシレンの水素原子が、Q₁、Q₂、Q₃の位置で重水素原子により置換された場合には、記号：H [1 D, 2 D, 3 D] とし、また、Q₄、Q₅、Q₇の位置で置換された場合は、記号：H [5 D, 6 D, 7 D] として [] 内の番号で重水素置換位置を示すこととする。



- 5 また、組成物例および実施例中において、特に断りのない限り「%」は「重量%」を示し、化合物にシス-トランス異性体が存在する場合には、その化合物はトランス型である。

組成物例 1

	2 O-B (2, 3 F) B (3 F) 2 B-3 (化合物 No. 1)	15.0%
10	3-HEB-O4	24.0%
	4-HEB-O2	17.0%
	5-HEB-O1	17.0%
	3-HEB-O2	15.0%
	5-HEB-O2	12.0%

15 組成物例 2

	2-BB (2, 3 F) 2 B (2, 3 F) -3 (化合物 No. 62)	15.0%
	3-HEB-O4	24.0%
	4-HEB-O2	17.0%
20	5-HEB-O1	17.0%
	3-HEB-O2	15.0%
	5-HEB-O2	12.0%

組成物例 3

	2-BB (2 F) 2 B (2, 3 F) -3 (化合物 No. 50)	8.0%
25	2-BB (2, 3 F) 2 B (2, 3 F) -3 (化合物 No. 62)	2.0%
	3-HH-2	5.0%
	3-HH-4	6.0%
	3-HH-O1	4.0%
	3-HH-O3	5.0%

	5-HH-O 1	4. 0 %
	3-HB (2, 3 F) -O 2	1 2. 0 %
	5-HB (2, 3 F) -O 2	1 1. 0 %
	3-HHB (2, 3 F) -O 2	1 4. 0 %
5	5-HHB (2, 3 F) -O 2	1 5. 0 %
	3-HHB (2, 3 F) - 2	1 4. 0 %
組成物例 4		
	2 O-B (2, 3 F) B (3 F) 2 B-3 (化合物No. 1)	1 2. 0 %
	2-BB (2 F) 2 B (2, 3 F) - 3 (化合物No. 5 0)	1 2. 0 %
10	2-BB (2, 3 F) 2 B (2, 3 F) - 3 (化合物No. 6 2)	
		1 2. 0 %
	3-HH-4	3. 0 %
	3-HH-O 1	4. 0 %
	3-HH-O 3	4. 0 %
15	3-HB-O 1	1 0. 0 %
	3-HB-O 2	5. 0 %
	3-HB (2, 3 F) -O 2	1 0. 0 %
	3-HHB (2, 3 F) -O 2	5. 0 %
	3-HHB (2, 3 F) - 2	4. 0 %
20	2-HHB (2, 3 F) - 1	4. 0 %
	3-HHEH-3	5. 0 %
	3-HHEH-5	5. 0 %
	4-HHEH-3	5. 0 %
組成物例 5		
25	2-BB (2 F) 2 B (2, 3 F) - 3 (化合物No. 5 0)	2. 0 %
	2-BB (2, 3 F) 2 B (2, 3 F) - 3 (化合物No. 6 2)	5. 0 %
	3-BB (2, 3 F) -O 2	2. 0 %
	3-BB (2, 3 F) -O 4	1 0. 0 %
	5-BB (2, 3 F) -O 4	3. 0 %

	2-BB (2, 3 F) B-3	25.0%
	3-BB (2, 3 F) B-5	13.0%
	5-BB (2, 3 F) B-5	14.0%
	5-BB (2, 3 F) B-7	16.0%
5	組成物例 6	
	2O-B (2, 3 F) B (3 F) 2B-3 (化合物No. 1)	5.0%
	2O-B (2 F) B (2, 3 F) OCH ₂ B-3 (化合物No. 163)	5.0%
	3-BB (2, 3 F) -O2	10.0%
10	5-BB-5	9.0%
	5-BB-O6	9.0%
	5-BB-O8	4.0%
	1-BEB-5	6.0%
	5-BEB-5	3.0%
15	3-HEB-O2	20.0%
	5-BBB (2, 3 F) -7	9.0%
	3-H2BB (2 F) -5	20.0%
	組成物例 7	
	2O-B (2, 3 F) B (3 F) 2B-3 (化合物No. 1)	10.0%
20	2-BB (2 F) 2B (2, 3 F) -3 (化合物No. 50)	2.0%
	3-HB-O1	15.0%
	3-HB-O2	6.0%
	3-HEB (2, 3 F) -O2	9.0%
	4-HEB (2, 3 F) -O2	9.0%
25	5-HEB (2, 3 F) -O2	9.0%
	2-BB2B-O2	6.0%
	3-BB2B-O2	6.0%
	1-B2BB (2 F) -5	7.0%
	3-B2BB (2 F) -5	7.0%

	5-B (3F) BB-O 2	7. 0 %
	3-BB (2, 3F) B-3	7. 0 %
	組成物例 8	
	2-BB (2F) 2B (2, 3F) - 3 (化合物No. 50)	3. 0 %
5	2-BB (2, 3F) 2B (2, 3F) - 3 (化合物No. 62)	2. 0 %
	3-HB-O 1	9. 0 %
	3-HB-O 2	9. 0 %
	3-HB-O 4	9. 0 %
	2-BTB-O 1	5. 0 %
10	3-BTB (2, 3F) -O 2	13. 0 %
	5-BTB (2, 3F) -O 2	13. 0 %
	3-B (2, 3F) TB (2, 3F) -O 4	4. 0 %
	5-B (2, 3F) TB (2, 3F) -O 4	4. 0 %
	3-HBTB-O 1	5. 0 %
15	3-HBTB-O 2	5. 0 %
	3-HBTB-O 3	5. 0 %
	3-HHB (2, 3F) -O 2	6. 0 %
	5-HBB (2, 3F) -O 2	5. 0 %
	5-BPr (3F) -O 2	3. 0 %
20	組成物例 9	
	2O-B (2, 3F) B (3F) 2B-3 (化合物No. 1)	5. 0 %
	2-BB (2F) 2B (2, 3F) - 3 (化合物No. 50)	5. 0 %
	3-HB-O 2	10. 0 %
	5-HB-3	8. 0 %
25	5-BB (2, 3F) -O 2	10. 0 %
	3-HB (2, 3F) -O 2	10. 0 %
	5-HB (2, 3F) -O 2	3. 0 %
	3-HHB (2, 3F) -O 2	12. 0 %
	5-HHB (2, 3F) -O 2	4. 0 %

	5-HHB (2, 3 F) -1 O 1	4. 0 %
	2-HHB (2, 3 F) -1	5. 0 %
	3-HHB (2, 3 F) -1	5. 0 %
	3-HBB-2	6. 0 %
5	3-BB (2, 3 F) B-3	8. 0 %
	5-B 2 BB (2, 3 F) B-O 2	5. 0 %
組成物例 1 0		
	2 O-B (2, 3 F) B (3 F) 2 B-3 (化合物 No. 1)	7. 0 %
	3-HB-O 2	2 0. 0 %
10	1 O 1-HH-3	6. 0 %
	3-HH-EMe	1 0. 0 %
	4-HEB-O 1	9. 0 %
	4-HEB-O 2	7. 0 %
	5-HEB-O 1	8. 0 %
15	3-HHB-1	6. 0 %
	3-HHB-3	6. 0 %
	4-HEB (2, 3 C) -O 4	3. 0 %
	6-HEB (2, 3 C) -O 4	3. 0 %
	3-HEB (2, 3 C) -O 5	4. 0 %
20	4-HEB (2, 3 C) -O 5	3. 0 %
	5-HEB (2, 3 C) -O 5	2. 0 %
	2-HBEB (2, 3 C) -O 2	2. 0 %
	4-HBEB (2, 3 C) -O 4	4. 0 %
組成物例 1 1		
25	2 O-B (2, 3 F) B (3 F) 2 B-3 (化合物 No. 1)	5. 0 %
	2-BB (2 F) 2 B (2, 3 F) -3 (化合物 No. 5 0)	5. 0 %
	2-BB (2, 3 F) 2 B (2, 3 F) -3 (化合物 No. 6 2)	5. 0 %
	1 V 2-BEB (3, 5 F) -C	5. 0 %
	V 2-HB-C	6. 0 %

	1 - BTB - 3	5. 0 %
	1 O 1 - HH - 3	3. 0 %
	3 - HH - 4	6. 0 %
	3 - HHB - 1	11. 0 %
5	3 - HHB - 3	3. 0 %
	3 - H ₂ BTB - 2	4. 0 %
	3 - H ₂ BTB - 3	4. 0 %
	3 - H ₂ BTB - 4	4. 0 %
	3 - HB (3 F) TB - 2	6. 0 %
10	3 - HB (3 F) TB - 3	5. 0 %
	3 - HHB - C	3. 0 %
	組成物例 1 2	
	2 O - B (2, 3 F) B (3 F) 2 B - 3 (化合物 No. 1)	12. 0 %
	5 - PyB - F	4. 0 %
15	3 - PyB (3 F) - F	4. 0 %
	2 - BB - C	5. 0 %
	4 - BB - C	4. 0 %
	5 - BB - C	5. 0 %
	2 - PyB - 2	2. 0 %
20	3 - PyB - 2	2. 0 %
	4 - PyB - 2	2. 0 %
	6 - PyB - O 5	3. 0 %
	3 - PyBB - F	6. 0 %
	4 - PyBB - F	6. 0 %
25	5 - PyBB - F	6. 0 %
	3 - HHB - 1	6. 0 %
	3 - HHB - 3	5. 0 %
	2 - H ₂ BTB - 2	4. 0 %
	2 - H ₂ BTB - 3	4. 0 %

	2-H 2 B T B-4	5. 0 %
	3-H 2 B T B-2	5. 0 %
	3-H 2 B T B-3	5. 0 %
	3-H 2 B T B-4	5. 0 %
5	組成物例 1 3	
	2 O-B (2, 3 F) B (3 F) 2 B-3 (化合物 No. 1)	5. 0 %
	2-B B (2 F) 2 B (2, 3 F)-3 (化合物 No. 5 0)	4. 0 %
	2 O 1-B E B (3 F)-C	5. 0 %
	3 O 1-B E B (3 F)-C	12. 0 %
10	5 O 1-B E B (3 F)-C	4. 0 %
	1 V 2-B E B (3, 5 F)-C	1 0. 0 %
	3-H E B-O 4	4. 0 %
	3-H H-E M e	6. 0 %
	3-H B-O 2	1 8. 0 %
15	7-H E B-F	2. 0 %
	3-H H E B-F	2. 0 %
	5-H H E B-F	2. 0 %
	3-H B E B-F	4. 0 %
	2 O 1-H B E B (3 F)-C	2. 0 %
20	3-H B (3 F) E B (3 F)-C	2. 0 %
	3-H B E B (3, 5 F)-C	2. 0 %
	3-H H B-F	4. 0 %
	3-H H B-O 1	4. 0 %
	3-H E B E B-F	2. 0 %
25	3-H E B E B-1	2. 0 %
	3-H H B (3 F)-C	4. 0 %
	組成物例 1 4	
	2-B B (2 F) 2 B (2, 3 F)-3 (化合物 No. 5 0)	7. 0 %
	2-B B (2, 3 F) 2 B (2, 3 F)-3 (化合物 No. 6 2)	3. 0 %

	5 - B E B (3 F) - C	5. 0 %
	V - H B - C	1 1. 0 %
	5 - P y B - C	6. 0 %
	4 - B B - 3	4. 0 %
5	V 2 V - H H - 5	4. 0 %
	3 - H H - 2 V	1 0. 0 %
	5 - H H - V	7. 0 %
	V - H H B - 1	7. 0 %
	V 2 - H H B - 1	1 5. 0 %
10	3 - H H B - 1	6. 0 %
	1 V 2 - H B B - 2	1 0. 0 %
	3 - H H E B H - 3	5. 0 %
	組成物例 1 5	
	2 - B B (2 F) 2 B (2, 3 F) - 3 (化合物 No. 5 0)	1 0. 0 %
15	5 - B T B (3 F) T B - 3	1 0. 0 %
	V 2 - H B - T C	1 0. 0 %
	3 - H B - T C	1 0. 0 %
	3 - H B - C	1 0. 0 %
	5 - H B - C	7. 0 %
20	5 - B B - C	3. 0 %
	2 - B T B - 1	2. 0 %
	2 - B T B - O 1	5. 0 %
	3 - H H - 4	5. 0 %
	3 - H H B - 1	1 0. 0 %
25	3 - H H B - 3	9. 0 %
	3 - H 2 B T B - 2	3. 0 %
	3 - H 2 B T B - 3	3. 0 %
	3 - H B (3 F) T B - 2	3. 0 %

組成物例 1 6

	2-BB (2, 3 F) 2 B (2, 3 F) - 3 (化合物No. 62)	10.0%
	1 V 2-BEB (3, 5 F) - C	6.0%
	3-HB-C	18.0%
5	2-BTB-1	5.0%
	5-HH-VFF	27.0%
	1-BHH-VFF	8.0%
	1-BHH-2 VFF	11.0%
	3-H2BTB-2	5.0%
10	3-H2BTB-3	4.0%
	3-H2BTB-4	4.0%
	3-HHB-1	2.0%
	組成物例 17	
	2-BB (2 F) 2 B (2, 3 F) - 3 (化合物No. 50)	8.0%
15	7-HB (3 F) - F	5.0%
	3-HB-O2	10.0%
	3-HH-4	2.0%
	3-HH [5 D, 6 D, 7 D] - 4	3.0%
	2-HHB (3 F) - F	10.0%
20	3-HHB (3 F) - F	10.0%
	5-HH [5 D, 6 D, 7 D] B (3 F) - F	10.0%
	3-H2HB (3 F) - F	5.0%
	2-HBB (3 F) - F	3.0%
	3-HBB (3 F) - F	3.0%
25	5-HBB (3 F) - F	6.0%
	2-H2BB (3 F) - F	3.0%
	3-HHB-1	8.0%
	3-HHB-O1	5.0%
	3-HHB-3	4.0%

組成物例 18

	2 O-B (2, 3 F) B (3 F) 2 B-3 (化合物No. 1)	8. 0 %
	2-BB (2, 3 F) 2 B (2, 3 F) -3 (化合物No. 62)	3. 0 %
	2 O-B (2 F) B (2, 3 F) OCH ₂ B-3 (化合物No. 163)	
5		3. 0 %
	7-HB (3, 5 F) -F	5. 0 %
	3-H ₂ HB (3, 5 F) -F	12. 0 %
	4-H ₂ HB (3, 5 F) -F	6. 0 %
	3-HHB (3, 5 F) -F	10. 0 %
10	4-HHB (3, 5 F) -F	5. 0 %
	3-HBB (3, 5 F) -F	3. 0 %
	3-HHEB (3, 5 F) -F	10. 0 %
	4-HHEB (3, 5 F) -F	3. 0 %
	5-HHEB (3, 5 F) -F	3. 0 %
15	2-HBEB (3, 5 F) -F	3. 0 %
	3-HBEB (3, 5 F) -F	5. 0 %
	5-HBEB (3, 5 F) -F	3. 0 %
	3-HD (3, 5) B (3, 5 F) -F	8. 0 %
	3-HBCF ₂ OB-OCF ₃	4. 0 %
20	3-HHBB (3, 5 F) -F	6. 0 %

組成物例 19

	2 O-B (2, 3 F) B (3 F) 2 B-3 (化合物No. 1)	5. 0 %
	2-BB (2 F) 2 B (2, 3 F) -3 (化合物No. 50)	5. 0 %
	3-HB-CL	10. 0 %
25	5-HB-CL	4. 0 %
	7-HB-CL	4. 0 %
	1 O1-HH-5	5. 0 %
	2-HBB (3 F) -F	8. 0 %
	3-HBB (3 F) -F	8. 0 %

	5-HBB (3F) -F	14.0%
	4-HHB-CL	8.0%
	5-HHB-CL	8.0%
	3-H ₂ HB (3F) -CL	4.0%
5	3-HBB (3, 5F) -F	5.0%
	5-H ₂ BB (3, 5F) -F	4.0%
	3-HB (3F) VB-2	4.0%
	3-H ₂ BTB-2	4.0%
組成物例 20		
10	2O-B (2, 3F) B (3F) 2B-3 (化合物No. 1)	8.0%
	2O-B (2F) B (2, 3F) OCH ₂ B-3 (化合物No. 163)	2.0%
	5-HB-F	12.0%
	6-HB-F	9.0%
15	7-HB-F	7.0%
	2-HHB-OCF ₃	7.0%
	3-HHB-OCF ₃	7.0%
	4-HHB-OCF ₃	7.0%
	5-HHB-OCF ₃	5.0%
20	3-HH ₂ B-OCF ₃	4.0%
	5-HH ₂ B-OCF ₃	4.0%
	3-HHB (3, 5F) -OCF ₃	5.0%
	3-HBB (3F) -F	10.0%
	3-HH ₂ B (3F) -F	3.0%
25	3-HB (3F) BH-3	3.0%
	5-HBBH-3	3.0%
	3-HHB (3, 5F) -OCF ₂ H	4.0%

組成物例 21

	2O-B (2, 3F) B (3F) 2B-3 (化合物No. 1)	10.0%
--	-------------------------------------	-------

	2-BB (2F) 2B (2, 3F) - 3 (化合物No. 50)	2. 0%
	5-H4HB (3, 5F) - F	7. 0%
	5-H4HB-OCF ₃	15. 0%
	3-H4HB (3, 5F) - CF ₃	8. 0%
5	5-H4HB (3, 5F) - CF ₃	10. 0%
	3-HB-CL	6. 0%
	5-HB-CL	2. 0%
	2-H2BB (3F) - F	5. 0%
	5-HVHB (3, 5F) - F	5. 0%
10	3-HHB-OCF ₃	5. 0%
	3-H2HB-OCF ₃	5. 0%
	V-HHB (3F) - F	5. 0%
	3-HHB (3F) - F	5. 0%
	5-HHEB-OCF ₃	2. 0%
15	3-HBEB (3, 5F) - F	5. 0%
	5-HH-V2F	3. 0%

組成物例 2 2

	2O-B (2, 3F) B (3F) 2B-3 (化合物No. 1)	15. 0%
	2-BB (2F) 2B (2, 3F) - 3 (化合物No. 50)	3. 0%
20	2-BB (2, 3F) 2B (2, 3F) - 3 (化合物No. 62)	3. 0%
	2O-B (2F) B (2, 3F) OCH ₂ B-3 (化合物No. 163)	3. 0%
	2-HHB (3F) - F	2. 0%
	3-HHB (3F) - F	2. 0%
25	5-HHB (3F) - F	2. 0%
	2-HBB (3F) - F	6. 0%
	3-HBB (3F) - F	6. 0%
	5-HBB (3F) - F	10. 0%
	2-H2BB (3F) - F	9. 0%

	3-H2BB(3F)-F	9.0%
	3-HBB(3,5F)-F	15.0%
	5-HBB(3,5F)-F	5.0%
	101-HBBH-4	5.0%
5	101-HBBH-5	5.0%

発明を実施するための最良の形態

以下、実施例により本発明をより詳細に説明する。なお、各実施例中において、Cは結晶を、S_AはスメクチックA相を、S_BはスメクチックB相を、S_xは相構造未解析のスメクチック相を、Nはネマチック相を、Isoは等方相を示し、相転移温度の単位は全て℃である。

実施例1

4-エトキシ-2,3,3'-トリフルオロ-4'-(2-(4-プロピルフェニル)エチル)ビフェニル(2O-B(2,3F)B(3F)2B-3(化合物No.1))の製造。

15 (第一段) 4-エトキシ-2,3,3'-トリフルオロビフェニルの製造

4-エトキシ-2,3-ジフルオロヨードベンゼン〔4-エトキシ-2,3-ジフルオロベンゼンをsec-ブチルリチウムでリチオ化した後、ヨウ素と反応させて得た。〕20.0g(79.3mmol)、ジヒドロキシ(3-フルオロフェニル)ボラン〔3-フルオロブロモベンゼンとマグネシウムから調製したGrignard試薬とトリメトキシボランを反応させた後、塩酸で加水分解して得た。〕18.9g(118.9mmol)、K₂CO₃ 21.9g(158.6mmol)、5%Pd-C 2.0gおよびトルエン/エタノール/水(1/1/1)の混合溶媒100mlの混合物を13時間加熱還流させた。次に触媒を濾過により除去した後、トルエン150mlで抽出し、得られた有機層を水で3回洗淨した後、無水硫酸マグネシウム上で乾燥した。減圧下に溶媒を留去し、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー(溶出液:ヘプタン/トルエン=8/2)に付して、粗製の4-エトキシ-2,3,3'-トリフルオロビフェニル17.3gを得た。(収率:86.2%)

このものは、これ以上の精製を行わずに次の反応に使用した。

(第二段) 4-エトキシ-2, 3, 3'-トリフルオロ-4'-(1-ヒドロキシ-2-(4-プロピルフェニル)エチル)ビフェニルの製造

前段で得られた4-エトキシ-2, 3, 3'-トリフルオロビフェニル10.0 (39.6 mmol) のテトラヒドロフラン (THF) 50 ml 溶液中に sec-ブチルリチウム38 ml (1.04 M、シクロヘキサン溶液、39.6 mmol 相当) を-60℃以下を保ちながら滴下し、滴下終了後、同温度で1時間攪拌した。反応液に4-プロピルフェニルアセトアルデヒド6.3 g (36.0 mmol) のTHF 30 ml 溶液を-60℃以下を保ちながら滴下し、同温度で1時間攪拌した。

10 反応液に希塩酸200 ml を滴下した後、酢酸エチル100 ml で抽出した。得られた有機層を希炭酸水素ナトリウム水溶液で2回、水で3回洗浄した後、無水硫酸マグネシウム上で乾燥した。減圧下に溶媒を留去し、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー (溶出液: ヘプタン/酢酸エチル=8/2) に付して、粗製の4-エトキシ-2, 3, 3'-トリフルオロ-4'-(1-ヒドロキシ-2-(4-プロピルフェニル)エチル)ビフェニル6.1 g を得た。

15 (収率: 41.4%)

このものは、これ以上の精製を行わずに次の反応に使用した。

(第三段) 4-エトキシ-2, 3, 3'-トリフルオロ-4'-(2-(4-プロピルフェニル)ビニル)ビフェニルの製造

20 前段で得られた4-エトキシ-2, 3, 3'-トリフルオロ-4'-(1-ヒドロキシ-2-(4-プロピルフェニル)エチル)ビフェニル6.1 (14.8 mmol)、p-トルエンスルホン酸・一水和物0.3 g およびトルエン50 ml の混合物を、留出してくる水を抜きながら、2時間加熱還流させた。反応終了後、希炭酸水素ナトリウム水溶液で2回、水で3回洗浄した後、無水硫酸マグネシウム上で乾燥した。減圧下に溶媒を留去し、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー (溶出液: ヘプタン/トルエン=6/4) に付して、粗製の4-エトキシ-2, 3, 3'-トリフルオロ-4'-(2-(4-プロピルフェニル)ビニル)ビフェニル2.8 g を得た。(収率: 49.1%)

25 (第四段) 4-エトキシ-2, 3, 3'-トリフルオロ-4'-(2-(4-

プロピルフェニル) エチル) ビフェニルの製造

前段で得られた4-エトキシ-2, 3, 3'-トリフルオロ-4'-(2-(4-プロピルフェニル)ビニル)ビフェニル 2.8 g (7.0 mmol)、5
 5 %Pd-C 0.15 g およびトルエン/エタノール(1/1)の混合溶媒 50 ml
 を混合して水素還元を行った。水素の吸収が停止した後、濾過により触媒を除去した。減圧下に溶媒を留去し、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー(溶出液:ヘプタン/トルエン=8/2)に付して、粗製の4-エトキシ-2, 3, 3'-トリフルオロ-4'-(2-(4-プロピルフェニル)エチル)ビフェニル 2.4 g を得た。このものをエタノール/酢酸エチル(8/2)
 10 混合溶媒から再結晶して標題化合物 1.3 g を得た。(収率:44.6%)

この化合物は液晶相を示し、その転移温度は

C 73.9~74.5 N 83.5 Iso であった。

また、各スペクトルデータはよくその構造を支持した。

質量分析: 398 (M⁺)

15 ¹H-NMR (CDCl₃, TMS 内部標準)

δ (ppm)

0.94 (t, 3H)

1.39-1.76 (m, 5H)

2.57 (t, 2H)

20 2.93 (s, 4H)

4.16 (q, 2H)

6.78-7.25 (m, 9H)

以下に本発明の化合物を液晶組成物の成分として用いた場合の例を示す。各使用例において、NI はネマチック相-等方相転移温度(°C)を、Δε は誘電率異
 25 方性値を、Δn は屈折率異方性値を、η は粘度 (mPa·s) を、Vth はしきい値電圧 (V) を、VHR は電圧保持率 (%) を示す。

なお、η は 20°C で測定し、Δε、Δn、Vth およびねじれのピッチ (μm) は各々 25°C で測定し、VHR は左から順に 25°C、80°C および 100°C で測定した値を示した。

実施例 2 (使用例 1)

下記のシアノフェニルシクロヘキサン系液晶化合物を含む液晶組成物 (A) :

	4 - (トランス-4-プロピルシクロヘキシル) ベンゾニトリル	24 %、
	4 - (トランス-4-ペンチルシクロヘキシル) ベンゾニトリル	36 %、
5	4 - (トランス-4-ヘプチルシクロヘキシル) ベンゾニトリル	25 %、
	4 - (トランス-4-ペンチルシクロヘキシル) - 4' - シアノビフェニル	15 %

は、以下の物性を有する。

NI : 71.7、 $\Delta\epsilon$: 11.0、 Δn : 0.137、 η : 26.7、Vth
10 h : 1.78。

この組成物 (A) 85%と、実施例 1 で得られた 4-エトキシ-2,3,3'-トリフルオロ-4'-(2-(4-プロピルフェニル)エチル)ビフェニル (化合物 No. 1) 15%とからなる液晶組成物 (B) の物性値は次の通りであった。

15 NI : 69.0、 $\Delta\epsilon$: 9.1、 Δn : 0.142、 η : 31.0、Vth : 1.71。

この液晶組成物 (B) を -20℃ のフリーザー中に放置したが、60 日を越えてもスメクチック相の出現および結晶の析出はみられなかった。

実施例 3 (使用例 2)

20 下記のエステル系液晶化合物を含む液晶組成物 (C) :

	3-HEB-O2	17.2 %
	3-HEB-O4	27.6 %
	4-HEB-O2	20.7 %
	5-HEB-O1	20.7 %
25	5-HEB-O2	13.8 %

は、以下の物性を有する。

NI : 74.0、 $\Delta\epsilon$: -1.43。

この組成物 (C) 85%と、実施例 1 で得られた 4-エトキシ-2,3,3'-トリフルオロ-4'-(2-(4-プロピルフェニル)エチル)ビフェニル

(化合物No. 1) 15%とからなる液晶組成物(D)の物性値は次の通りであった。

NI : 75.6、 $\Delta\epsilon$: -2.04。

この液晶組成物(D)を-20℃のフリーザー中に放置したが、60日を越えてもスメクチック相の出現および結晶の析出はみられなかった。

実施例1の方法に準じて以下の化合物を合成することができる。なお、ここに示した物性値は実施例3に準じて測定した組成物の値である。

化合物No. 2 : 1-B(2, 3F)B(3F)2B-3

化合物No. 3 : 3-B(2, 3F)B(3F)2B-2

10 NI : 67.0、 $\Delta\epsilon$: -1.50

化合物No. 4 : 5-B(2, 3F)B(3F)2B-2

化合物No. 5 : 10-B(2, 3F)B(3F)2B-2

化合物No. 6 : 15-B(2, 3F)B(3F)2B-5

化合物No. 7 : 30-B(2, 3F)B(3F)2B-2

15 化合物No. 8 : 80-B(2, 3F)B(3F)2B-3

化合物No. 9 : 200-B(2, 3F)B(3F)2B-4

化合物No. 10 : 3-B(2, 3F)B(2F)2B-3

化合物No. 11 : 4-B(2, 3F)B(2F)2B-2

化合物No. 12 : 12-B(2, 3F)B(2F)2B-8

20 化合物No. 13 : 10-B(2, 3F)B(2F)2B-5

化合物No. 14 : 40-B(2, 3F)B(2F)2B-2

化合物No. 15 : 50-B(2, 3F)B(2F)2B-101

化合物No. 16 : 2-B(2, 3F)B2B(2F)-3

化合物No. 17 : 3-B(2, 3F)B2B(2F)-4

25 化合物No. 18 : 7-B(2, 3F)B2B(2F)-2

化合物No. 19 : 3-B(2, 3F)B2B(2F)-301

化合物No. 20 : 20-B(2, 3F)B2B(2F)-2

化合物No. 21 : 50-B(2, 3F)B2B(2F)-3

化合物No. 22 : 60-B(2, 3F)B2B(2F)-3

- 化合物No. 23 : 2-B (2, 3F) B 2 B (2F) - 3
化合物No. 24 : 1-B (2, 3F) B 2 B (3F) - 5
化合物No. 25 : 2-B (2, 3F) B 2 B (3F) - 3
化合物No. 26 : 3-B (2, 3F) B 2 B (3F) - 2
5 化合物No. 27 : 4-B (2, 3F) B 2 B (3F) - 1
化合物No. 28 : 5O1-B (2, 3F) B 2 B (3F) - 3
化合物No. 29 : 2O-B (2, 3F) B 2 B (3F) - O3
化合物No. 30 : 3O-B (2, 3F) B 2 B (3F) - O2
化合物No. 31 : 5O-B (2, 3F) B 2 B (3F) - O3
10 化合物No. 32 : 3-B (2F) B (2, 3F) 2B-5
化合物No. 33 : 5-B (2F) B (2, 3F) 2B-2
化合物No. 34 : 1O4-B (2F) B (2, 3F) 2B-3
化合物No. 35 : 2O-B (2F) B (2, 3F) 2B-5
化合物No. 36 : 5O-B (2F) B (2, 3F) 2B-2
15 化合物No. 37 : 1-B (3F) B (2, 3F) 2B-4
化合物No. 38 : 3-B (3F) B (2, 3F) 2B-5
化合物No. 39 : 4O1-B (3F) B (2, 3F) 2B-3
化合物No. 40 : 3O-B (3F) B (2, 3F) 2B-3
化合物No. 41 : 4O-B (3F) B (2, 3F) 2B-3
20 化合物No. 42 : 2-BB (2, 3F) 2B (2F) - 3
化合物No. 43 : 1O-BB (2, 3F) 2B (2F) - 2
化合物No. 44 : 2O1-BB (2, 3F) 2B (2F) - 3
化合物No. 45 : 8O2-BB (2, 3F) 2B (2F) - 2
化合物No. 46 : 3O-BB (2, 3F) 2B (2F) - 2
25 化合物No. 47 : 4-BB (2, 3F) 2B (3F) - 3
化合物No. 48 : 8-BB (2, 3F) 2B (3F) - 1O
化合物No. 49 : 1O5-BB (2, 3F) 2B (3F) - 1O3
化合物No. 50 : 2-B (2F) B (2F) 2B (2, 3F) - 3
化合物No. 51 : 3-B (2F) B (2F) 2B (2F) - 2

WO 98/23563

- 化合物No. 52: 3O-B(2F)B(2F)2B(2F)-3
 化合物No. 53: 5-B(2F)B(2F)2B(3F)-1
 化合物No. 54: 2O-B(2F)B(2F)2B(3F)-1O5
 化合物No. 55: 4O-B(2F)B(3F)2B(2F)-2
 5 化合物No. 56: 5-B(2F)B(3F)2B(3F)-O3
 化合物No. 57: 2-B(3F)B(2F)2B(2F)-5
 化合物No. 58: 1O4-B(3F)B(2F)2B(3F)-3
 化合物No. 59: 15-B(3F)B(3F)2B(2F)-2
 化合物No. 60: 3-B(3F)B(3F)2B(3F)-O3
 10 化合物No. 61: 2-B(2, 3F)B(2, 3F)2B-6
 化合物No. 62: 3-B(2, 3F)2B(2, 3F)B-2
 NI: 67. 8、 $\Delta\epsilon$: -1. 75
 化合物No. 63: 4-B(2, 3F)B(2, 3F)2B-2
 化合物No. 64: 6-B(2, 3F)B(2, 3F)2B-5
 15 化合物No. 65: 1O5-B(2, 3F)B(2, 3F)2B-2
 化合物No. 66: 3O-B(2, 3F)B(2, 3F)2B-1
 化合物No. 67: 4O-B(2, 3F)B(2, 3F)2B-2
 化合物No. 68: 5O-BB(2, 3F)2B(2, 3F)-2
 化合物No. 69: 3-B(2, 3F)B2B(2, 3F)-O2
 20 化合物No. 70: 3O-B(2, 3F)B2B(2, 3F)-O1
 化合物No. 71: 3-B(2, 3F)B(2F)2B(2F)-2
 化合物No. 72: 5-B(2, 3F)B(2F)2B(2F)-2
 化合物No. 73: 1O3-B(2, 3F)B(2F)2B(2F)-1O2
 化合物No. 74: 3O-B(2, 3F)B(2F)2B(2F)-3
 化合物No. 75: 4O-B(2, 3F)B(2F)2B(2F)-4
 25 化合物No. 76: 1-B(2, 3F)B(2F)2B(3F)-1
 化合物No. 77: 3-B(2, 3F)B(2F)2B(3F)-2
 化合物No. 78: 4-B(2, 3F)B(2F)2B(3F)-3
 化合物No. 79: 1O5-B(2, 3F)B(2F)2B(3F)-2

WO 98/23563

- 化合物No. 80: 2O-B (2, 3F) B (2F) 2B (3F) - 3
 化合物No. 81: 5O-B (2, 3F) B (2F) 2B (3F) - 3
 化合物No. 82: 8O-B (2, 3F) B (2F) 2B (3F) - 3
 化合物No. 83: 2O-B (2, 3F) B (2F) 2B (3F) - O3
 5 化合物No. 84: 3O-B (2, 3F) B (2F) 2B (3F) - O2
 化合物No. 85: 2-B (2, 3F) B (3F) 2B (2F) - 5
 化合物No. 86: 5-B (2, 3F) B (3F) 2B (2F) - 2
 化合物No. 87: 5O5-B (2, 3F) B (3F) 2B (2F) - 2
 化合物No. 88: 3O-B (2, 3F) B (3F) 2B (2F) - 2
 10 化合物No. 89: 4O-B (2, 3F) B (3F) 2B (2F) - 3
 化合物No. 90: 2-B (2, 3F) B (3F) 2B (3F) - 5
 化合物No. 91: 3-B (2, 3F) B (3F) 2B (3F) - 3
 化合物No. 92: 5-B (2, 3F) B (3F) 2B (3F) - 3
 化合物No. 93: 4-B (2, 3F) B (3F) 2B (3F) - O2
 15 化合物No. 94: 10-B (2, 3F) B (3F) 2B (3F) - 3
 化合物No. 95: 2O-B (2, 3F) B (3F) 2B (3F) - 2
 化合物No. 96: 3O-B (2, 3F) B (3F) 2B (3F) - O2
 化合物No. 97: 5O-B (2, 3F) B (3F) 2B (3F) - O3
 化合物No. 98: 3-B (2, 3F) B (2, 3F) 2B (2F) - 2
 20 化合物No. 99: 3-B (2, 3F) B (2, 3F) 2B (2F) - 3
 化合物No. 100: 4-B (2, 3F) B (2, 3F) 2B (2F) - 2
 化合物No. 101: 2O-B (2, 3F) B (2, 3F) 2B (2F) - 2
 化合物No. 102: 4O-B (2, 3F) B (2, 3F) 2B (2F) - 5
 化合物No. 103: 3O-B (2, 3F) B (2, 3F) 2B (2F) - O2
 25 化合物No. 104: 15O-B (2, 3F) B (2, 3F) 2B (2F) - O
 13
 化合物No. 105: 2-B (2, 3F) B (2, 3F) 2B (3F) - 3
 化合物No. 106: 2-B (2, 3F) B (2, 3F) 2B (3F) - 4
 化合物No. 107: 3-B (2, 3F) B (2, 3F) 2B (3F) - 2

- 化合物No. 108 : 3-B (2, 3F) B (2, 3F) 2B (3F) - 5
化合物No. 109 : 3-B (2, 3F) B (2, 3F) 2B (3F) - O 2
化合物No. 110 : 4-B (2, 3F) B (2, 3F) 2B (3F) - O 3
化合物No. 111 : 2O-B (2, 3F) B (2, 3F) 2B (3F) - O 2
5 化合物No. 112 : 3O-B (2, 3F) B (2, 3F) 2B (3F) - O 2
化合物No. 113 : 5O-B (2, 3F) B (2, 3F) 2B (3F) - O 3
化合物No. 114 : 1-B (2, 3F) B (2, 3F) 2B (2, 3F) - 3
化合物No. 115 : 2-B (2, 3F) B (2, 3F) 2B (2, 3F) - 2
化合物No. 116 : 3-B (2, 3F) B (2, 3F) 2B (2, 3F) - 4
10 化合物No. 117 : 4-B (2, 3F) B (2, 3F) 2B (2, 3F) - 3
化合物No. 118 : 5-B (2, 3F) B (2, 3F) 2B (2, 3F) - O
2
化合物No. 119 : 7-B (2, 3F) B (2, 3F) 2B (2, 3F) - O
3
15 化合物No. 120 : 1O-B (2, 3F) B (2, 3F) 2B (2, 3F) -
O 3
化合物No. 121 : 2O-B (2, 3F) B (2, 3F) 2B (2, 3F) -
O 5
化合物No. 122 : 3O-B (2, 3F) B (2, 3F) 2B (2, 3F) -
20 O 2
化合物No. 123 : 5O-B (2, 3F) B (2, 3F) 2B (2, 3F) -
O 2
化合物No. 124 : 2-B (2, 3F) B (2F) 4B - 2
化合物No. 125 : 2-B (2, 3F) B (3F) 4B - 5
25 化合物No. 126 : 3O-B (2, 3F) B 4B (3F) - O 5
化合物No. 127 : 2O1-B (2F) B (2, 3F) 4B - 5
化合物No. 128 : 7-BB (2, 3F) 4B (3F) - 2O1
化合物No. 129 : 5O-B (2, 3F) B (2, 3F) 4B - 3
化合物No. 130 : 2O-B (2, 3F) B 4B (2, 3F) - O 3

- 化合物No. 131: 101-B(2F)B(2, 3F)4B(3F)-O4
 化合物No. 132: 3-B(2, 3F)B(2, 3F)4B(3F)-O6
 化合物No. 133: 3-B(2, 3F)B(3F)4B(2, 3F)-2
 化合物No. 134: 15-B(2, 3F)2B(3F)2B-20
 5 化合物No. 135: 2O-B(2, 3F)2B2B(3F)-3
 化合物No. 136: 4O-B(2F)2B(2, 3F)2B-5
 化合物No. 137: 3-B(2, 3F)2B(2, 3F)2B-3
 化合物No. 138: 2O-B(2F)2B(2, 3F)2B(3F)-1O3
 化合物No. 139: 3O-B(2, 3F)2B2B(2, 3)-O2
 10 化合物No. 140: 1O3-B(2, 3F)2B(2, 3F)2B(3F)-3
 化合物No. 141: 5-B(2, 3F)2B(2F)2B(2, 3F)-2

実施例 4

- 2, 3, 3'-トリフルオロ-4'-(4-エチルフェニル)メトキシ-4-プロピルビフェニル(2-BCH₂OB(2F)B(2, 3F)-3(化合物No. 142)の製造

(第一段) 2, 3, 3'-トリフルオロ-4'-ヒドロキシ-4-プロピルビフェニルの製造

- 2, 3, 3'-トリフルオロ-4'-メトキシメトキシ-4-プロピルビフェニル[Pd触媒存在下、2, 3-ジフルオロ-4-プロピルヨードベンゼンとジヒドロキシ(3-フルオロ-4-メトキシメトキシフェニル)ボランとのクロスカップリング反応によって得た。] 10.0g(32.2mmol)、メタノール50mlおよび濃塩酸10mlの溶液を3時間加熱還流させた。反応液に水50mlを加え、ジエチルエーテル100mlで抽出した。得られた有機層を希炭酸水素ナトリウム水溶液で2回、水で3回洗浄した後、無水硫酸マグネシウム上で乾燥した。減圧下に溶媒を留去して、粗製の2, 3, 3'-トリフルオロ-4'-ヒドロキシ-4-プロピルビフェニル8.5gを得た。(収率: 99.8%)

このものは、これ以上の精製を行わずに次の反応に使用した。

(第二段) 2, 3, 3'-トリフルオロ-4'-(4-エチルフェニル)メトキシ-4-プロピルビフェニルの製造

水素化ナトリウム 0.7 g (60%油性、18.0 mmol 相当) およびジメチルホルムアミド (DMF) 3 ml の混合物中に、前段で得られた 2, 3, 3'-トリフルオロ-4'-ヒドロキシ-4-プロピルビフェニル 4.0 g (15.0 mmol) の DMF 20 ml 溶液を室温で滴下し、同温度で 1 時間攪拌した。

次いで、反応液に 4-エチル-1-ヨードメチルベンゼン 5.5 g (22.5 mmol) の DMF 20 ml 溶液を室温で滴下し、同温度で 1 時間攪拌後、3 時間加熱還流させた。反応終了後、反応液を水 50 ml 中に注ぎ、トルエン 150 ml で抽出した。得られた有機層を希水酸化ナトリウム水溶液で 3 回、水で 3 回洗浄した後、無水硫酸マグネシウム上で乾燥した。減圧下に溶媒を留去し、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー (溶出液: ヘプタン/トルエン = 7/3) に付して、粗製の 2, 3, 3'-トリフルオロ-4'-(4-エチルフェニル)メトキシ-4-プロピルビフェニル 2.3 g を得た。このものをエタノール/酢酸エチル (7/3) 混合溶媒から再結晶して標題化合物 1.9 g を得た。(収率: 33.3%)

実施例 5

実施例 4 の方法に準じて以下の化合物を合成することができる。

化合物 No. 143: 5-B(2, 3F)B(3F)OCH₂B-3

化合物 No. 144: 12-B(2, 3F)B(3F)OCH₂B-4

化合物 No. 145: 101-B(2, 3F)B(3F)OCH₂B-5

化合物 No. 146: 30-B(2, 3F)B(3F)OCH₂B-4

化合物 No. 147: 50-B(2, 3F)B(3F)OCH₂B-2

化合物 No. 148: 2-B(2, 3F)B(3F)CH₂OB-4

化合物 No. 149: 3-B(2, 3F)B(3F)CH₂OB-7

化合物 No. 150: 4-B(2, 3F)B(3F)CH₂OB-103

化合物 No. 151: 20-B(2, 3F)B(3F)CH₂OB-5

化合物 No. 152: 40-B(2, 3F)B(3F)CH₂OB-2

化合物 No. 153: 1-B(2, 3F)B(2F)OCH₂B-2

- 化合物No. 154 : 3-B (2, 3F) B (2F) OCH₂B-4
 化合物No. 155 : 5O-B (2, 3F) B (2F) OCH₂B-3O1
 化合物No. 156 : 2-B (2, 3F) B (2F) CH₂OB-3
 化合物No. 157 : 8-B (2, 3F) B (2F) CH₂OB-5
 5 化合物No. 158 : 3O-B (2, 3F) B (2F) CH₂OB-2
 化合物No. 159 : 3-B (2, 3F) BOCH₂B (2F) -3
 化合物No. 160 : 5-B (2, 3F) BCH₂OB (2F) -2
 化合物No. 161 : 3O-B (2, 3F) BOCH₂B (3F) -O1
 化合物No. 162 : 8-B (2, 3F) BCH₂OB (3F) -7
 10 化合物No. 163 : 2O-B (2F) B (2, 3F) OCH₂B-3
 化合物No. 164 : 5-BB (2, 3F) OCH₂B (3F) -O2
 化合物No. 165 : 4-B (2, 3F) B (2, 3F) OCH₂B-3
 化合物No. 166 : 5O-B (2, 3F) B (2, 3F) CH₂OB-2
 化合物No. 167 : 3O1-B (2, 3F) B (2, 3F) OCH₂B-2
 15 化合物No. 168 : 6-B (2, 3F) BCH₂OB (2, 3F) -O2
 化合物No. 169 : 1O1-BB (2, 3F) CH₂OB (2, 3F) -O3
 化合物No. 170 : 12O-B (2F) B (2, 3F) OCH₂B (3F) -
 O3
 化合物No. 171 : 3-B (2, 3F) B (2, 3F) OCH₂B (2F) -
 20 2
 化合物No. 172 : 2O-B (2, 3F) B (2, 3F) OCH₂B-3
 化合物No. 173 : 5O-B (2, 3F) B (2, 3F) CH₂OB (2F)
 -3
 化合物No. 174 : 1O3-B (2, 3F) B (3F) CH₂OB (2, 3
 25 F) -10

実施例6 (使用例3)

組成物例1の液晶組成物の物性値は次の通りであった。

N.I : 75.6、 $\Delta\epsilon$: -2.0、 Δn : 0.099、 η : 21.2。

この液晶組成物を-20℃のフリーザー中に放置したが、60日を越えてもス

メクチック相の出現および結晶の析出はみられなかった。

実施例 7 (使用例 4)

組成物例 2 の液晶組成物の物性値は次の通りであった。

NI : 67.8、 $\Delta\epsilon$: -1.8、 Δn : 0.093、 η : 22.4。

- 5 この液晶組成物を-20℃のフリーザー中に放置したが、60日を越えてもメクチック相の出現および結晶の析出はみられなかった。

実施例 8 (使用例 5)

組成物例 3 の液晶組成物の物性値は次の通りであった。

NI : 88.9、 $\Delta\epsilon$: -3.9、 Δn : 0.085、VHR : 98.1、97.2、96.7。

- 10 この液晶組成物を-20℃のフリーザー中に放置したが、60日を越えてもメクチック相の出現および結晶の析出はみられなかった。

実施例 9 (使用例 6)

組成物例 4 の液晶組成物の物性値は次の通りであった。

- 15 NI : 64.1、 $\Delta\epsilon$: -2.7、 Δn : 0.103。

この液晶組成物を-20℃のフリーザー中に放置したが、60日を越えてもメクチック相の出現および結晶の析出はみられなかった。

実施例 10 (使用例 7)

組成物例 5 の液晶組成物の物性値は次の通りであった。

- 20 NI : 74.8、 $\Delta\epsilon$: -3.5、 Δn : 0.199。

この液晶組成物を-20℃のフリーザー中に放置したが、60日を越えてもメクチック相の出現および結晶の析出はみられなかった。

実施例 11 (使用例 8)

組成物例 6 の液晶組成物の物性値は次の通りであった。

- 25 NI : 78.1、 $\Delta\epsilon$: -3.0、 Δn : 0.146。

この液晶組成物を-20℃のフリーザー中に放置したが、60日を越えてもメクチック相の出現および結晶の析出はみられなかった。

実施例 12 (使用例 9)

組成物例 7 の液晶組成物の物性値は次の通りであった。

WO 98/23563

NI: 72.2、 $\Delta\epsilon$: -2.9、 Δn : 0.156、 η : 27.4。

この液晶組成物を-20℃のフリーザー中に放置したが、60日を越えてもスメクチック相の出現および結晶の析出はみられなかった。

実施例13 (使用例10)

5 組成物例8の液晶組成物の物性値は次の通りであった。

NI: 83.1、 Δn : 0.212。

この液晶組成物を-20℃のフリーザー中に放置したが、60日を越えてもスメクチック相の出現および結晶の析出はみられなかった。

実施例14 (使用例11)

10 組成物例9の液晶組成物の物性値は次の通りであった。

NI: 74.6、 $\Delta\epsilon$: -3.9、 Δn : 0.126。

この液晶組成物を-20℃のフリーザー中に放置したが、60日を越えてもスメクチック相の出現および結晶の析出はみられなかった。

実施例15 (使用例12)

15 組成物例10の液晶組成物の物性値は次の通りであった。

NI: 62.3、 $\Delta\epsilon$: -5.8、 Δn : 0.085、 η : 42.0。

この液晶組成物を-20℃のフリーザー中に放置したが、60日を越えてもスメクチック相の出現および結晶の析出はみられなかった。

実施例16 (使用例13)

20 組成物例11の液晶組成物の物性値は次の通りであった。

NI: 86.7、 $\Delta\epsilon$: 6.6、 Δn : 0.160、 V_{th} : 2.19。

組成物例11の液晶組成物100重量部に光学活性化合物CM-33を0.8重量部溶解した液晶組成物のねじれのピッチは11.4 μm であった。

この液晶組成物を-20℃のフリーザー中に放置したが、60日を越えてもスメクチック相の出現および結晶の析出はみられなかった。

25 実施例17 (使用例14)

組成物例12の液晶組成物の物性値は次の通りであった。

NI: 94.0、 $\Delta\epsilon$: 5.9、 Δn : 0.197、 η : 36.1、 V_{th} : 2.

4。

この液晶組成物を -20°C のフリーザー中に放置したが、60日を越えてもスメクチック相の出現および結晶の析出はみられなかった。

実施例18（使用例15）

組成物例13の液晶組成物の物性値は次の通りであった。

5 NI: 65.3、 $\Delta\epsilon$: 23.7、 Δn : 0.119、 η : 23.7、Vth: 1.01。

この液晶組成物を -20°C のフリーザー中に放置したが、60日を越えてもスメクチック相の出現および結晶の析出はみられなかった。

実施例19（使用例16）

10 組成物例14の液晶組成物の物性値は次の通りであった。

NI: 90.8、 $\Delta\epsilon$: 4.5、 Δn : 0.115、 η : 17.4、Vth: 2.40。

この液晶組成物を -20°C のフリーザー中に放置したが、60日を越えてもスメクチック相の出現および結晶の析出はみられなかった。

15 実施例20（使用例17）

組成物例15の液晶組成物の物性値は次の通りであった。

NI: 100.1、 $\Delta\epsilon$: 6.5、 Δn : 0.200、 η : 16.9、Vth: 2.15。

20 この液晶組成物を -20°C のフリーザー中に放置したが、60日を越えてもスメクチック相の出現および結晶の析出はみられなかった。

実施例21（使用例18）

組成物例16の液晶組成物の物性値は次の通りであった。

NI: 81.3、 $\Delta\epsilon$: 6.2、 Δn : 0.130、 η : 14.1、Vth: 2.12。

25 この液晶組成物を -20°C のフリーザー中に放置したが、60日を越えてもスメクチック相の出現および結晶の析出はみられなかった。

実施例22（使用例19）

組成物例17の液晶組成物の物性値は次の通りであった。

NI: 85.1、 $\Delta\epsilon$: 2.8、 Δn : 0.091、 η : 19.8、Vth: 2.

WO 98/23563

70。

組成物例17の液晶組成物100重量部に光学活性化合物CNを0.3重量部溶解した液晶組成物のねじれのピッチは78 μ mであった。

この液晶組成物を-20℃のフリーザー中に放置したが、60日を越えてもスメクチック相の出現および結晶の析出はみられなかった。

5

実施例23(使用例20)

組成物例18の液晶組成物の物性値は次の通りであった。

NI:75.0、 $\Delta\epsilon$:12.0、 Δn :0.130、 η :35.5、Vth:1.55。

10

この液晶組成物を-20℃のフリーザー中に放置したが、60日を越えてもスメクチック相の出現および結晶の析出はみられなかった。

実施例24(使用例21)

組成物例19の液晶組成物の物性値は次の通りであった。

NI:91.1、 $\Delta\epsilon$:4.1、 Δn :0.130、 η :21.6、Vth:2.50。

15

この液晶組成物を-20℃のフリーザー中に放置したが、60日を越えてもスメクチック相の出現および結晶の析出はみられなかった。

実施例25(使用例22)

組成物例20の液晶組成物の物性値は次の通りであった。

NI:84.3、 $\Delta\epsilon$:3.8、 Δn :0.095、 η :16.9、Vth:2.61、VHR:97.8、96.5、96.0。

20

この液晶組成物を-20℃のフリーザー中に放置したが、60日を越えてもスメクチック相の出現および結晶の析出はみられなかった。

実施例26(使用例23)

組成物例21の液晶組成物の物性値は次の通りであった。

NI:68.9、 $\Delta\epsilon$:7.6、 Δn :0.096、 η :26.3、Vth:1.90。

25

この液晶組成物を-20℃のフリーザー中に放置したが、60日を越えてもスメクチック相の出現および結晶の析出はみられなかった。

実施例 27 (使用例 24)

組成物例 22 の液晶組成物の物性値は次の通りであった。

N I : 94.1、 $\Delta \epsilon$: 5.4、 Δn : 0.138、 η : 38.8、V t h : 2.29。

- 5 組成物例 22 の液晶組成物 100 部に光学活性化合物 CM-43L を 0.2 部溶解した液晶組成物のねじれのピッチ長は 81 μ m であった。

実施例 28 (比較例 1)

- 10 実施例 7 において用いた 4-エチル-2', 3'-トリフルオロ-4'-(2-(2, 3-ジフルオロ-4-プロピルフェニル)エチル)ビフェニル (化合物 No. 62) に代えて特開平 2-4725 に記載の化合物 4-エチル-4'-(2-(2, 3-ジフルオロ-4-プロピルフェニル)エチル)ビフェニル (2-BB2B(2, 3F)-3) を用いた以外は、実施例 7 と同様にして得た液晶組成物 (E) の物性値は次の通りであった。

N I : 68.2、 $\Delta \epsilon$: -1.5、 Δn : 0.094、 η : 20.7。

- 15 このことから本発明の化合物が、公知の化合物と比較して大きな誘電率異方性値を有することがわかった。

実施例 29 (比較例 2)

- 20 実施例 14 において用いた 4-エトキシ-2, 3, 3'-トリフルオロ-4'-(2-(4-プロピルフェニル)エチル)ビフェニル (化合物 No. 1) および 3'-フルオロ-4-エチル-4'-(2-(2, 3-ジフルオロ-4-プロピルフェニル)エチル)ビフェニル (化合物 No. 50) に代えて、特開平 4-54146 に記載された一般式に包含される化合物 4-エチル-4'-(2, 3-ジフルオロ-4-プロピルフェニル)オキシメチル)ビフェニル (2-BBCH₂OB(2, 3F)-3) の 5% および DE3839213A1 に記載の化合物 4, 4''-ジメチル-2, 2'', 3, 3''-テトラフルオロテルフェニル (1-B(2, 3F)BB(2, 3F)-1) の 5% を用いた以外は、実施例 14 と同様にして得た液晶組成物 (F) の物性値は次の通りであった。

N I : 75.9、 $\Delta \epsilon$: -4.0、 Δn : 0.127。

この液晶組成物 (F) を -20℃ のフリーザー中に放置したところ 3 日でスメ

クチック相が出現した。

このことから本発明の化合物が、公知の化合物と比較して低温下でスメクチック相を示しにくいことがわかった。

- 5 本発明の液晶性化合物は極めて高い電圧保持率および低いしきい値電圧を有し、それらの温度依存性が極めて小さく、スメクチック相を示しにくいというえ、他の液晶材料との相溶性が改善されている。また、本発明の液晶性化合物は置換基等を適当に選択することにより、所望の物性を有する新たな液晶性化合物を提供することができる。

産業上の利用可能性

- 10 従って、本発明の液晶性化合物を液晶組成物の成分として用いることにより、極めて高い電圧保持率を有し、その温度依存性が極めて小さく、低いしきい値電圧、適切な大きさの Δn および $\Delta \epsilon$ を有し、安定性および他の液晶材料との相溶性に優れている新たな液晶組成物を提供することができ、これを用いてIPS方式やVA方式などの優れた液晶表示素子を提供することができる。

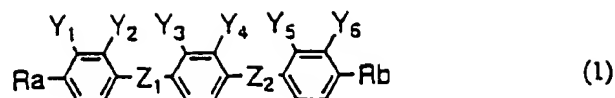
15

20

25

請求の範囲

1. 一般式(1)



5

(式中、R a および R b は各々独立して炭素数 1 ～ 20 の直鎖または分岐アルキル基を示し、これらの基中の相隣接しない任意のメチレン基 (—CH₂—) は酸素原子で置換されていてもよく；Y₁、Y₂、Y₃、Y₄、Y₅ および Y₆ は各々独立して水素原子またはフッ素原子を示すが、Y₁、Y₂、Y₃、Y₄、Y₅ および Y₆ のうち少なくとも 3 つはフッ素原子を示し；Z₁ および Z₂ は各々独立して—(CH₂)₂—、—(CH₂)₄—、—CH₂O—、—(CH₂)₃O—または単結合を示し、ただし、Z₁ および Z₂ が同時に単結合であることはなく；また、この化合物を構成する原子はいずれもその同位体で置換されていてもよい。) で表される液晶性化合物。

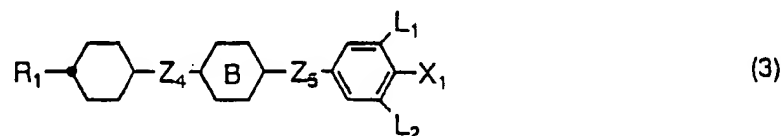
15 2. Z₁ または Z₂ の少なくとも一方が—(CH₂)₂—または—CH₂O—である請求の範囲 1 に記載の液晶性化合物。

3. 請求の範囲 1 ～ 2 のいずれか 1 項に記載の液晶性化合物を少なくとも 1 種含有することを特徴とする液晶組成物。

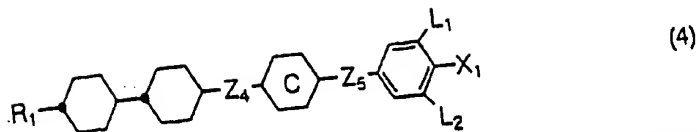
4. 第一成分として、請求の範囲 1 ～ 2 のいずれか 1 項に記載の液晶性化合物を
20 少なくとも 1 種含有し、第二成分として、一般式(2)、(3) および(4) からなる化合物群から選択される化合物を少なくとも 1 種含有することを特徴とする液晶組成物。



25

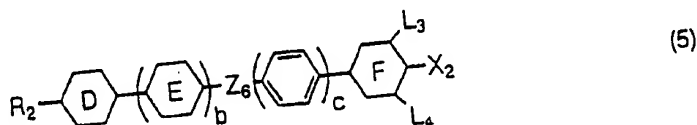


WO 98/23563

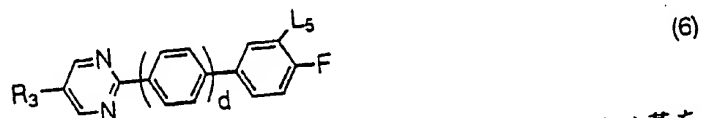


- (式中、 R_1 は炭素数1～10のアルキル基を示し、この基中の相隣接しない任意のメチレン基は酸素原子または $-\text{CH}=\text{CH}-$ で置換されていてもよく、また、この基中の任意の水素原子はフッ素原子で置換されていてもよく； X_1 はフッ素原子、塩素原子、 $-\text{OCF}_3$ 、 $-\text{OCF}_2\text{H}$ 、 $-\text{CF}_3$ 、 $-\text{CF}_2\text{H}$ 、 $-\text{CFH}_2$ 、 $-\text{OCF}_2\text{CF}_2\text{H}$ または $-\text{OCF}_2\text{CFHCF}_3$ を示し； L_1 および L_2 は各々独立して水素原子またはフッ素原子を示し； Z_4 および Z_5 は各々独立して $-(\text{CH}_2)_2-$ 、 $-(\text{CH}_2)_4-$ 、 $-\text{COO}-$ 、 $-\text{CF}_2\text{O}-$ 、 $-\text{OCF}_2-$ 、 $-\text{CH}=\text{CH}-$ または単結合を示し；環Bはトランス-1, 4-シクロヘキシレン、1, 3-ジオキサン-2, 5-ジイル、または水素原子がフッ素原子で置換されていてもよい1, 4-フェニレンを示し；環Cはトランス-1, 4-シクロヘキシレン、または水素原子がフッ素原子で置換されてもよい1, 4-フェニレンを示し；また、これらの化合物を構成する原子はその同位体で置換されてもよい。)
5. 第一成分として、請求の範囲1～2のいずれか1項に記載の液晶性化合物を少なくとも1種含有し、第二成分として、一般式(5)および(6)からなる化合物群から選択される化合物を少なくとも1種含有することを特徴とする液晶組成物。

20



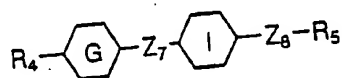
25



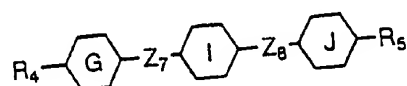
- (式中、 R_2 および R_3 は各々独立して炭素数1～10のアルキル基を示し、この基中の相隣接しない任意のメチレン基は酸素原子または $-\text{CH}=\text{CH}-$ で置換されていてもよく、また、この基中の任意の水素原子はフッ素原子で置換されていてもよく； X_2 は $-\text{CN}$ 基または $-\text{C}\equiv\text{C}-\text{CN}$ を示し；環Dはトランス-1,

WO 98/23563

- 4-シクロヘキシレン、1, 4-フェニレン、1, 3-ジオキサン-2, 5-ジ
 イルまたはピリミジン-2, 5-ジイルを示し；環Eはトランス-1, 4-シク
 ロヘキシレン、ピリミジン-2, 5-ジイル、または水素原子がフッ素原子で置
 換されてもよい1, 4-フェニレンを示し；環Fはトランス-1, 4-シクロヘ
 キシレンまたは1, 4-フェニレンを示し；Z₆は-(CH₂)₂-, -COO-
 5 または単結合を示し；L₃、L₄およびL₅は各々独立して水素原子またはフッ素
 原子を示し；b、cおよびdは各々独立して0または1を示し；また、これらの
 化合物を構成する原子はその同位体で置換されていてもよい。）
 6. 第一成分として、請求の範囲1~2のいずれか1項に記載の液晶性化合物を
 10 少なくとも1種含有し、第二成分として、前記一般式(2)、(3)および(4)
 からなる化合物群から選択される化合物を少なくとも1種含有し、第三成分
 として、一般式(7)、(8)および(9)からなる化合物群から選択される化
 合物を少なくとも1種含有することを特徴とする液晶組成物。

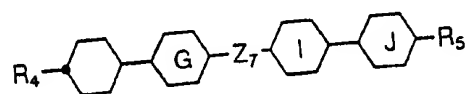


15



(8)

20

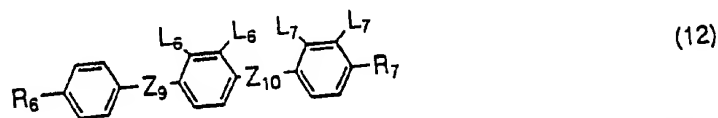
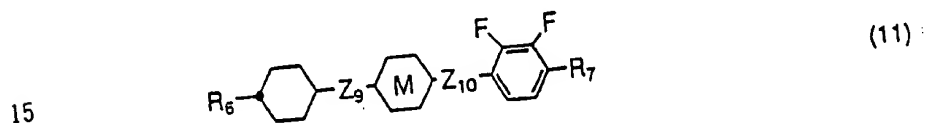


(9)

- (式中、R₄およびR₅は各々独立して炭素数1~10のアルキル基を示し、この
 基中の相隣接しない任意のメチレン基は酸素原子または-CH=CH-で置換さ
 25 れていてもよく、また、この基中の任意の水素原子はフッ素原子で置換され
 ていてもよく；環G、環Iおよび環Jは各々独立して、トランス-1, 4-シクロヘ
 キシレン、ピリミジン-2, 5-ジイル、または水素原子がフッ素原子で置
 換されてもよい1, 4-フェニレンを示し；Z₇およびZ₈は各々独立して、-C
 ≡C-, -COO-, -(CH₂)₂-, -CH=CH-または単結合を示し；ま

WO 98/23563

- た、これらの化合物を構成する原子はその同位体で置換されていてもよい。)
7. 第一成分として、請求の範囲1~2のいずれか1項に記載の液晶性化合物を少なくとも1種含有し、第二成分として、前記一般式(5)および(6)からなる化合物群から選択される化合物を少なくとも1種含有し、第三成分として、前記一般式(7)、(8)および(9)からなる化合物群から選択される化合物を少なくとも1種含有することを特徴とする液晶組成物。
8. 第一成分として、請求の範囲1~2のいずれか1項に記載の液晶性化合物を少なくとも1種含有し、第二成分として、一般式(10)、(11)および(12)からなる化合物群から選択される化合物を少なくとも1種含有することを特徴とする液晶組成物。



- 20 (式中、R₆およびR₇は各々独立して炭素数1~10のアルキル基を示し、この基中の相隣接しない任意のメチレン基は酸素原子または-CH=CH-で置換されていてもよく、また、この基中の任意の水素原子はフッ素原子で置換されていてもよく；環Kおよび環Mは各々独立して、トランス-1, 4-シクロヘキシレンまたは1, 4-フェニレンを示し；L₆およびL₇は各々独立して水素原子またはフッ素原子を示すが同時に水素原子であることはなく；Z₉およびZ₁₀は各々独立して-(CH₂)₂-, -COO-または単結合を示し；またこれらの化合物を構成する原子はその同位体で置換されていてもよい。)
- 25 9. 第一成分として、請求の範囲1~2のいずれか1項に記載の液晶性化合物を少なくとも1種含有し、第二成分として、前記一般式(7)、(8)および(

9) からなる化合物群から選択される化合物を少なくとも1種含有し、第三成分として、前記一般式(10)、(11)および(12)からなる化合物群から選択される化合物を少なくとも1種含有することを特徴とする液晶組成物。

10. 第一成分として、請求の範囲1~2のいずれか1項に記載の液晶性化合物
5 を少なくとも1種含有し、第二成分として、前記一般式(2)、(3)および
(4)からなる化合物群から選択される化合物を少なくとも1種含有し、第三成分として、前記一般式(5)および(6)からなる化合物群から選択される化合物を少なくとも1種含有し、第四成分として、前記一般式(7)、(8)および
10 (9)からなる化合物群から選択される化合物を少なくとも1種含有することを
特徴とする液晶組成物。

11. 請求の範囲3~10のいずれか1項に記載の液晶組成物に、さらに1種以上の光学活性化合物を含有することを特徴とする液晶組成物。

12. 請求の範囲3~11のいずれか1項に記載の液晶組成物を用いて構成した
15 液晶表示素子。

15

20

25

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP97/04330

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER Int.Cl ⁶ C07C25/18, C07C43/225, C07C43/174, C09K19/10, G02F1/13 According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC				
B. FIELDS SEARCHED Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols) Int.Cl ⁶ C07C25/18, C07C43/225, C07C43/174, C09K19/10, G02F1/13 Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched				
Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used) CAS ONLINE				
C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT				
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.		
X	JP, 4-103554, A (Sanyo Chemical Industries, Ltd.), April 6, 1992 (06. 04. 92), Claims (Family: none)	1-3		
X	JP, 4-198140, A (Sanyo Chemical Industries, Ltd.), July 17, 1992 (17. 07. 92), Claims (Family: none)	1-3		
A	JP, 1-157925, A (F. Hoffmann-La Roche & Co. AG.), June 21, 1989 (21. 06. 89) & EP, 315014, A2 & DE, 3887084, A1 & US, 5230826, A & US, 5302317, A & US, 5454974, A	1-12		
A	JP, 2-501311, A (Merck Patent GmbH.), May 10, 1990 (10. 05. 90) & WO, 89/02884, A1 & DE, 3732284, A1 & EP, 334911, A1 & US, 5324449, A	1-12		
<input checked="" type="checkbox"/> Further documents are listed in the continuation of Box C. <input type="checkbox"/> See patent family annex.				
<table border="0"> <tr> <td style="vertical-align: top;"> * Special categories of cited documents: "A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance "E" earlier document but published on or after the international filing date "L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified) "O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means "P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed </td> <td style="vertical-align: top;"> "T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention "X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone "Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art "&" document member of the same patent family </td> </tr> </table>			* Special categories of cited documents: "A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance "E" earlier document but published on or after the international filing date "L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified) "O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means "P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed	"T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention "X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone "Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art "&" document member of the same patent family
* Special categories of cited documents: "A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance "E" earlier document but published on or after the international filing date "L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified) "O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means "P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed	"T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention "X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone "Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art "&" document member of the same patent family			
Date of the actual completion of the international search February 27, 1998 (27. 02. 98)		Date of mailing of the international search report March 10, 1998 (10. 03. 98)		
Name and mailing address of the ISA/ Japanese Patent Office		Authorized officer		
Facsimile No.		Telephone No.		

Form PCT/ISA/210 (second sheet) (July 1992)

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP97/04330

C (Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	JP, 3-500413, A (Merck Patent GmbH.), January 31, 1991 (31. 01. 91) & WO, 90/01056, A1 & DE, 3909802, A1 & EP, 381728, A1 & US, 5389292, A	1-12
A	JP, 4-169573, A (Seiko Epson Corp.), June 17, 1992 (17. 06. 92) (Family: none)	1-12
A	JP, 4-282355, A (Seimi Chemical Co., Ltd.), October 7, 1992 (07. 10. 92) (Family: none)	1-12
P	JP, 9-137164, A (Chisso Corp.), May 27, 1997 (27. 05. 97) (Family: none)	1-12
P	JP, 9-157202, A (Chisso Corp.), June 17, 1997 (17. 06. 97) & AU, 9675864, A	1-12

Form PCT/ISA/210 (continuation of second sheet) (July 1992)

国際調査報告		国際出願番号 PCT/J P 97/04330	
A. 発明の属する分野の分類 (国際特許分類 (IPC)) Int. Cl. ⁸ C07C25/18, C07C43/225, C07C43/174, C09K19/10, G02F1/13			
B. 調査を行った分野 調査を行った最小限資料 (国際特許分類 (IPC)) Int. Cl. ⁸ C07C25/18, C07C43/225, C07C43/174, C09K19/10, G02F1/13			
最小限資料以外の資料で調査を行った分野に含まれるもの			
国際調査で利用した電子データベース (データベースの名称、調査に使用した用語) CAS ONLINE			
C. 関連すると認められる文献		関連する 請求の範囲の番号	
引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示		
X	J P, 4-103554, A (三洋化成工業株式会社) 6, 4月, 1992 (06. 04. 92) 特許請求の範囲 (ファミリーなし)	1~3	
X	J P, 4-198140, A (三洋化成工業株式会社) 17, 7月, 1992 (17. 07. 92) 特許請求の範囲 (ファミリーなし)	1~3	
A	J P, 1-157925, A (エフ・ホフマン・ラ・ロシュ・ウン ト・コンパニー・アクチエンゲゼルシャフト) 21. 6月. 198 9 (21. 06. 89) & EP, 315014, A2&DE, 38 87084, A1&US, 5230826, A&US, 53023 17, A&US, 5454974, A	1~12	
<input checked="" type="checkbox"/> C欄の続きにも文献が列挙されている。 <input type="checkbox"/> パテントファミリーに関する別紙を参照。			
* 引用文献のカテゴリー 「A」 特に関連のある文献ではなく、一般的技术水準を示すもの 「E」 先行文献ではあるが、国際出願日以後に公表されたもの 「L」 優先権主張に疑義を提起する文献又は他の文献の発行日若しくは他の特別な理由を確立するために引用する文献 (理由を付す) 「O」 口頭による開示、使用、展示等に言及する文献 「P」 国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願			
国際調査を完了した日 27. 02. 98		国際調査報告の発送日 10.03.98	
国際調査機関の名称及びあて先 日本国特許庁 (ISA/J P) 郵便番号 100-8915 東京都千代田区霞が関三丁目4番3号		特許庁審査官 (権限のある職員) 船岡 嘉彦 印	
		電話番号 03-3581-1101 内線 3443	
様式 PCT/ISA/210 (第2ページ) (1992年7月)			

C (続き) 関連すると認められる文献		
引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求の範囲の番号
A	J P, 2-501311, A (メルク・パテント・ゲゼルシャフト・ミット・ベシュレンクテル・ハフツング) 10. 5月. 1990 (10. 05. 90) & WO, 89/02884, A1 & DE, 3732284, A1 & EP, 334911, A1 & US, 5324449, A	1~12
A	J P, 3-500413, A (メルク・パテント・ゲゼルシャフト・ミット・ベシュレンクテル・ハフツング) 31. 1月. 1991 (31. 01. 91) & WO, 90/01056, A1 & DE, 3909802, A1 & EP, 381728, A1 & US, 5389292, A	1~12
A	J P, 4-169573, A (セイコーエプソン株式会社) 17. 6月. 1992 (17. 06. 92) (ファミリーなし)	1~12
A	J P, 4-282355, A (セイミケミカル株式会社) 7. 10月. 1992 (07. 10. 92) (ファミリーなし)	1~12
P	J P, 9-137164, A (チッソ株式会社) 27. 5月. 1997 (27. 05. 97) (ファミリーなし)	1~12
P	J P, 9-157202, A (チッソ株式会社) 17. 6月. 1997 (17. 06. 97) & AU, 9675864, A	1~12